

307.226

24  
1976

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

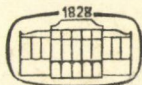
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXIV. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1976



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# AZ $\alpha$ -BOMLÁS ELMÉLETE ÉS ALKALMAZÁSAI\*

APAGYI BARNABÁS

Kvantumelméleti Kutató Csoport, BME, Fizikai Intézet

## TARTALOMJEGYZÉK

Tartalomjegyzék .....	1
1. Bevezetés .....	2
2. Az $\alpha$ -bomlásra vonatkozó kísérleti adatok .....	3
2.1. A radioaktív bomlások fizikai jellemzői .....	3
2.2. Elméleti magyarázatra váró kísérleti tények az $\alpha$ -bomlások köréből .....	5
3. Az $\alpha$ -bomlás elméleti leírása .....	6
3.1. Megmaradási tételek .....	6
3.2. Egytest elméletek .....	8
3.3. Soktest elméletek .....	13
3.3.1. Az $\alpha$ -bomlás $R$ -matrix elmélete .....	13
3.3.2. Az $\alpha$ -bomlás Mang-féle elmélete .....	20
4. Számítási eredmények a reguláris $\alpha$ -bomlásokra vonatkozóan .....	27
4.1. Nehéz atommagok $\alpha$ -bomlása .....	27
4.1.1. A $^{212}\text{Po}$ atommag izomer állapotának szerkezete .....	27
4.1.2. A $^{211}\text{Po}$ atommag $\alpha$ -bomlásának finomszerkezete .....	30
4.2. Az $^{16}\text{O}$ atommag $2^+$ spinparitású gerjesztett állapotainak redukált szélessége .....	31
4.2.1. Kísérlet redukált szélességek meghatározása az $R$ -mátrix elmélet alapján .....	31
4.2.2. Zuker hullámfüggvények használata .....	33
4.2.3. Elméleti redukált szélességek illesztése a kísérleti értékekhez .....	34
5. Az $^{16}\text{O}$ atommag 8,87 MeV energiájú gerjesztett állapotának irreguláris $\alpha$ -bomlása .....	35
5.1. Az irreguláris $\alpha$ -bomlás elmélete .....	37
5.1.1. Perturbációszámítás .....	37
5.1.2. Visszavezetés reguláris $\alpha$ -bomlásra .....	38
5.2. A 6,92 MeV energiájú nívó redukált szélesség amplitúdójának meghatározása .....	40
6. Összefoglalás .....	41
Köszönetnyilvánítás .....	42
Irodalomjegyzék .....	42

\* Egyetemi doktori disszertáció. 1974. Készült a Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Intézetének Kvantumelméleti Kutató Csoportjában.



## 1. BEVEZETÉS

Az atommagok *radioaktivitása* ( $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -sugárzás) már régóta értékes eszköz a természet jelenségeit és törvényeit kutató fizikus számára.

*Becquerel* 1896-ban fedezte fel a radioaktivitást, s az ő kísérletei nyomán, rádium preparátum felhasználásával, *Rutherford* és *Soddy* bebizonyította, hogy az atomok nem állandóak. Ez az 1909-ben végzett kísérlet azt is bizonyította, hogy a rádium  $\alpha$ -sugárzása a helium tulajdonságaival rendelkezik.

$\alpha$ -sugárzó preparátum felhasználásával *Rutherford* és munkatársai 1911-ben újabb, nagy jelentőségű kísérletsorozatot végeztek. Ez tette lehetővé először az ember számára, hogy bepillantást nyerjen az atom belsejébe. *Rutherford*  $\alpha$ -részecskéknél vékony fólián történő szóródását vizsgálta az  $\alpha$ -részecske sebességének, a fólia vastagságának és koncentrációjának, valamint a szórócentrum pozitív töltésének és a részecskék szóródási szögének a függvényében. Ez a kísérlet adott először jelet az atommagról és annak méretéről. Ezenkívül az  $\alpha$ -részecske és az atommag közti kölcsönhatásban észlelt anomáliákból új típusú, nem Coulomb eredetű kölcsönhatásra lehetett következtetni. Ezt az új típusú kölcsönhatást, heves voltára utalva, *erőskölcsönhatásnak* nevezték el.

Jól ismeretes az is, hogy a radioaktivitás egy másik formája, a  $\beta$ -sugárzás tanulmányozása vezetett el a neutrino hipotézis felállításához (*Pauli* 1931), a *gyengekölcsönhatás* felfedezéséhez és elméletének kidolgozásához (*Fermi* 1934, *Gell-Mann* és *Feynman* 1957), valamint a *gyengekölcsönhatás paritássértő* jellegének kísérleti kimutatásához (*Wu* 1957).

Az atommag  $\gamma$ -sugárzása, bár nem vezetett a fentiekhez hasonló látványos eredményekhez, ugyancsak értékes segítőtársnak bizonyult az atommag szerkezetét kutató fizikus számára. A  $\gamma$ -sugárzás elektromágneses sugárzás, s ezért az *elektromágneses kölcsönhatás* törvényeinek engedelmeskedik. Ezek a törvények viszont jól ismeretesek a fizika más területeiről (pl. az atomburok fizikájából), s így az atommag  $\gamma$ -sugárzásának megfigyelt tulajdonságaiból vissza lehet következtetni az atommag egyes jellemző adataira (pl. energia, spin, paritás).

A dolgozatban a háromfajta természetes radioaktivitás közül az  $\alpha$ -sugárzásról ( $\alpha$ -bomlásról) lesz szó.

Az  $\alpha$ -bomlás hasonló a  $\gamma$ -sugárzáshoz annyiban, hogy a kisugárzott részecske *monoenergiás*, a  $\beta$ -sugárzáshoz annyiban, hogy a kisugárzott  $\alpha$ -részecske *töltéssel* rendelkezik.

Az  $\alpha$ -bomlást *kísérletileg* jól ismerjük: az energiafelesleggel rendelkező atommagból kilökődik egy jól meghatározott energiájú és impulzuszórájú  $\alpha$ -részecske ( ${}^4\text{He}$ -atommag), miközben az eredeti atommag tömegszáma négyvel, rendszáma kettővel csökken.

Az  $\alpha$ -bomlást *elméletileg* kevésbé értjük. A dolgozatban megkísérlem ezért, hogy áttekintést adjak az  $\alpha$ -bomlás különféle elméleteiről, amelyek közül hármát részletesen ismertetek (3. fejezet). Ezen elméleteket alkalmazom kis- és nagytömegszámú atommagok bomlási valószínűségének meghatározására (4. fejezet).

Az  $\alpha$ -bomlást az atommag nukleonjai között működő erők hozzák létre. Ezek az erők elsődlegesen a *nukleáris* és *Coulomb* kölcsönhatásból származnak, s így csak olyan állapotváltozást engednek meg, amelyben a kezdeti és a végállapot paritása megegyezik. A természetben azonban a különféle erők (kölcsönhatások) együttesen fejtik ki hatásukat, azokat egymástól elválasztani nem lehet. Ez azt jelenti, hogy előállhat az atommagban olyan helyzet, amikor a nukleonok között mindig is jelen levő *gyengekölcsönhatás* lesz a felelős egy effektus létrejöttéért. Ekkor viszont a kiinduló állapot paritása nem egyezik meg a végállapot paritásával, lévén a *gyengekölcsönhatás paritássértő* kölcsönhatás. Ilyen állapotváltozást az  $\alpha$ -bomlások körében is megfigyelték, s az effektust *irreguláris  $\alpha$ -bomlásnak* nevezték el.

Az irreguláris  $\alpha$ -bomlás szélességének kiszámolását a perturbációszámítás segítségével vissza lehet vezetni a reguláris, tehát a paritást őrző  $\alpha$ -bomlási szélességek számolására\*. Azonban a perturbációs sorfejtésben olyan mátrixelemek is fellépnek, amelyeknek megfelelő  $\alpha$ -bomlás nem megy végbe a természetben, így ezeket csupán számításal határozhatjuk meg. (A reguláris szélességek kísérletből is vehetők.) Pl. az  ${}^{16}\text{O}$  atommag 8,87 MeV gerjesztési energiával és  $2^-$  spinparitással rendelkező állapotából történő irreguláris  $\alpha$ -bomlás esetén a sorfejtésben fellép egy olyan mátrixelem, a 6,92 MeV energiájú,  $2^+$  spinparitású szint bomlását jelenti. Ez az állapot az  ${}^{16}\text{O} \rightarrow \alpha + {}^{12}\text{C}$  bomlásra vonatkozó 7,16 MeV küszöb alatt van, ezért tehát energetikailag lehetetlen a bomlás.

\* (L. 5. fejezet.)



A dolgozat fő célja az, hogy megbízható számértéket szolgáltatson az előbb említett mátrixelemre, ami által az  $^{16}\text{O}$  atommag  $8,87 \text{ MeV } 2^-$  állapotából történő irreguláris  $\alpha$ -bomlás szélességének az eddigieknél pontosabb elméleti meghatározására nyílik lehetőség (5. fejezet).

Az irreguláris  $\alpha$ -bomlás elméleti számolása viszont függ attól a gyengekölsönhatás modelltől, amit használunk (Cabbibo modell, nemkonvencionális modell). Összehasonlítva az elméletileg nyert szélességek értékeit a kísérletileg mért értékkel, várható, hogy dönteni lehet valamelyik gyengekölsönhatás modell javára.

Ily módon azt látjuk, hogy az atommag  $\alpha$ -bomlása — történeti szerepét kinőve — nemcsak az atommag szerkezetéről ad értékes információkat, hanem a különböző gyengekölsönhatási modellek (egyéb kísérletekből el nem dönthető) jóságáról is felvilágosítást szolgáltat.

Ezen célkitűzés megvalósításának természetes mellékterméke egy olyan  $\alpha$ -bomlás szélességet számoló computer program kifejlesztése, amely eléggé hajlékony ahhoz, hogy mind a kis, mind pedig a nagy tömegszámú magok bomlási szélességét a kísérletekkel megegyezően produkálja. A program hajlékonyságának szükséges feltétele az is, hogy egyazon atommag különböző gerjesztett állapotaiából történő bomlások szélességeit is helyesen adja vissza. A 4. fejezetből kitűnik, hogy ezen két kritériumot a program teljesíti.

A dolgozatban az  $\alpha$ -sugárzásra vonatkozó tapasztalati anyagból csak azokat a legalapvetőbb tényeket vettem át, amelyek az elmélet alapjául és egyben próbakövéül szolgálnak. Ezen alapvető kísérleti adatok a 2. fejezetben találhatók.

## 2. AZ $\alpha$ -BOMLÁSRA VONATKOZÓ KÍSÉRLETI ADATOK

### 2.1. A radioaktív bomlások fizikai jellemzői

Tekintsünk egy olyan radioaktív anyagot, amely a  $t$  időpillanatban  $N(t)$  számú azonos radioaktív atommagot tartalmaz. Tegyük fel, hogy az anyag csak egyféleképpen (pl. monoenergiás  $\alpha$ -részecskék kibocsátásával) bomlik. A kísérletek tanúsága szerint a  $dt$  idő alatt elbomló magok  $dN$  száma egyenesen arányos az idővel és a rendelkezésre álló magok számával,

$$dN = -\lambda N(t) dt. \quad (2.1.1)$$

A képletben szereplő  $\lambda$  mennyiség a radioaktív atommag egyik fontos jellemzője.  $\lambda \cdot N$  jelenti ugyanis az időegység alatt elbomló atommagok számát, így  $\lambda$  annak valószínűségéként értelmezhető, hogy egy individuális atommag elbomlik időegység alatt. Tehát  $\lambda$  magának az atommagnak a jellemzője, értékét az atommag mikrostruktúrája határozza meg, s így azt várjuk, hogy azonos atommagokra állandó. A kísérletek tanúsága szerint ez kivétel nélkül így is van. Ezért  $\lambda$ -t *bomlásállandónak* nevezzük.

A bomlásállandó reciproka nyilván a radioaktív mag várható, vagy más néven, *közepes élettartama*:

$$\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (2.1.2)$$

A radioaktív mag időbizonytalansága

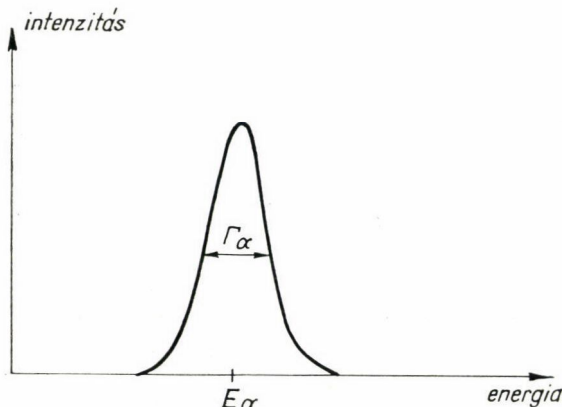
$$\Delta t = \frac{\tau}{2} \quad (2.1.3)$$

s így, a Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés értelmében, a mag állapotának energiabizonytalansága vagy *szélessége*:

$$\Gamma \sim \frac{\hbar}{\tau} = \hbar \lambda. \quad (2.1.4)$$



A bomló atommag energiaállapotának ezen természetes kiszélesedése (elmosódottsága) a kibocsátott  $\alpha$ -, ill.  $\gamma$ -részecskék spektrumában is egy természetes kiszélesedéshez vezet. (L. 1. ábra.) Merve ezen kiszélesedés félértékszélességét,  $\Gamma_\alpha$ -t, kiszámolható  $\Gamma$ , s ezáltal  $\lambda$  is. Hosszú élettartamú, nagyon stabil állapotok  $\alpha$ -bomlással szemben mutatott szélességét természetesen ezzel a módszerrel nem lehet meghatározni, ez esetben más, a kísérleti irodalomban [1] ismertetett módszereket alkalmaznak.



1. ábra

Gyakran használatos fogalom a *felezési idő*. Ez azt az időtartamot jelenti, ami alatt az  $N$  számú radioaktív atommag fele elbomlik. Integrálva a (2.1.1) egyenletet, megkapjuk a  $t$  időpillanatban jelenlevő radioaktív atommagok számát

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (2.1.5)$$

Itt  $N_0$  a  $t=0$  időpontban meglevő magok számát jelenti. Ez  $\tau_{1/2}$  felezési idő alatt csökken a felére

$$N(\tau_{1/2}) = \frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda \tau_{1/2}}. \quad (2.1.6)$$

Ebből a felezési időre

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2 \quad (2.1.7)$$

adódik. Tehát a radioaktív preparátum fele valamivel hamarabb bomlik el (lévén  $\ln 2 = 0,693$ ), mint amennyi egy kiszemelt atommag átlagos (közepes) élettartama.

Amennyiben egy radioaktív mag két- vagy többféleképp bomlik, úgy az atommagok számának változása  $dt$  idő alatt

$$dN = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots) N dt, \quad (2.1.8)$$

ahol  $\lambda_i$  a különböző bomlásokhoz tartozó valószínűség. (2.1.8)-ból következik, hogy az eredő bomlási állandó

$$\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots \quad (2.1.9)$$

a különböző bomlási valószínűségek összegével egyenlő.

A továbbiakban mindig csak egyféleképp, nevezetesen  $\alpha$ -sugárzással bomló atommagokkal fogunk foglalkozni.

## 2.2. Elméleti magyarázatra váró kísérleti tények az $\alpha$ -bomlások köréből

A radioaktív anyag által kibocsátott  $\alpha$ -részecskék gyakoriságát (időegységre eső beütések számát) mérve, meghatározható a bomló mag közepes élettartama és a radioaktív anyag felezési ideje (l. 2.1. szakasz).

I. TÁBLÁZAT

Izotóp	$\lambda$ [s <sup>-1</sup> ]	$\tau_{1/2}$ [s]	$E_\alpha$ [MeV]
$^{92}_{92}\text{U}^{238}$	$4,9 \cdot 10^{-18}$	$1,4 \cdot 10^{17}$	4,195
$^{92}_{92}\text{U}^{234}$	$8,8 \cdot 10^{-14}$	$7,9 \cdot 10^{12}$	4,768
$^{88}_{88}\text{Ra}^{226}$	$1,4 \cdot 10^{-11}$	$5,1 \cdot 10^{10}$	4,777
$^{88}_{88}\text{Ra}^{224}$	$2,1 \cdot 10^{-6}$	$3,3 \cdot 10^5$	5,681
$^{84}_{84}\text{Po}^{218}$	$3,8 \cdot 10^{-3}$	$1,8 \cdot 10^1$	5,998
$^{84}_{84}\text{Po}^{216}$	$4,4 \cdot 10^0$	$1,6 \cdot 10^{-1}$	6,774
$^{84}_{84}\text{Po}^{214}$	$4,6 \cdot 10^3$	$1,5 \cdot 10^{-4}$	7,680
$^{84}_{84}\text{Po}^{212}$	$2,3 \cdot 10^6$	$3,0 \cdot 10^{-7}$	8,780

Különböző  $\alpha$ -aktív anyagok felezési ideje 24 nagyságrendet átfogó,  $10^{17}$  s-tól  $10^{-7}$  s-ig terjedő tartományba esik. Másrészt, a mérések szerint, a kibocsátott  $\alpha$ -részek energiája 4—9 MeV között van. Jól szemlélteti ezt az I. táblázat [2], ahol néhány  $\alpha$ -aktív izotóp felezési idejét ( $\tau_{1/2}$ ) és a kisugárzott  $\alpha$ -részecske energiákat ( $E_\alpha$ ) tüntettük fel.

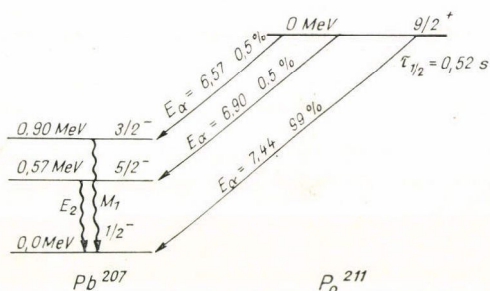
Bármely elméletnek számot kell adni tehát arról, hogy a kibocsátott  $\alpha$ -részek energiájának azonos nagyságrendje ellenére a felezési időkben 24 nagyságrend változás észlelhető.

Az  $\alpha$ -bomlás spektruma némely esetben *finomszerkezetet* mutat. Ez azt jelenti, hogy a domináló  $\alpha$ -sugárzás mellett — kisebb intenzitással — más energiájú  $\alpha$ -sugarak is észlelhetők. A 2. ábrán egy ilyen bomlás névsémája látható. Ez a típusú finomszerkezet megmagyarázható a leánymag különböző gerjesztett állapotaiba való bomlással. (Az  $^{207}\text{Pb}$  leánymag energianívói a legerjesztődéskor kibocsátott  $\gamma$ -kvantumok mérésével határozhatók meg.)

Hosszú élettartamú gerjesztett állapottal (izomer állapot) rendelkező  $\alpha$ -aktív mag esetében is létrejehet finomszerkezet. Míg előbb az anyamag alapállapotából a leánymag különböző gerjesztett, ill. alapállapotába vezetett a bomlás, addig ebben az esetben a finomszerkezet a mag izomer állapotából a leánymag különböző állapotaiba történő bomlás miatt keletkezik.

A finomszerktúra értelmezéséhez tehát feltétlenül szükséges az atommagok különböző állapotainak *szerkezetét* ismerni, és ezt az elméletnek figyelembe kell venni.

(A  $^{212}\text{Po}$  atommagnak van ilyen gerjesztett hosszú élettartamú állapota. A. 4. fejezetben részletesen kitérek majd ennek tárgyalására. Ugyancsak a 4. fejezetben tár-



2. ábra



gyalom a  $^{211}\text{Po}$  bomlásának finomszerkezetét. Mindkét esetben reprodukálni fogom a kísérleti adatokat az általam készített számítógép program segítségével.)

Az eddigi kísérleti adatokat kivétel nélkül az  $A \gtrsim 210$  tömegszámú nehéz magok köréből vettem. Ez a tartomány tartozik ugyanis a spontán  $\alpha$ -bomló atommagok körébe. Ahhoz, hogy  $\alpha$ -bomlás egyáltalán végbemehessen, az energiamegmaradás miatt szükséges az, hogy a bomlástermékek (leánymag,  $\alpha$ -részecske) tömegének összege kisebb legyen az anyamag tömegénél. Ez teljesül már a  $210 > A > 150$  tömegszámú magokra is, azonban itt, egy eset kivételével ( $^{147}\text{Sm}$ ), nem észleltek még  $\alpha$ -bomlást.

Az elméletnek erre a jelenségre is választ kell adnia.

Végül megadok néhány adatot a kis tömegszámú tartományból. Ezek jól reprezentálhatók az  $^{16}\text{O}$  különböző gerjesztett állapotainak bomlásával. Számunkra különösen fontos lesz az  $^{16}\text{O}$   $2^+$  spinparitású szintjeinek  $\alpha$ -bomlása, (l. 5. fejezet) ezért a II. táblázatban ezeket sorolom fel.

II. TÁBLÁZAT

Állapot	$E_{\text{gerj}} [\text{MeV}]$	$\Gamma_{\alpha} [\text{MeV}]$	$E_{\alpha} [\text{MeV}]$	Megjegyzés
$^{16}\text{O}$ $2^+$	9,85	0,001	2,02	reguláris
$^{16}\text{O}$ $2^+$	11,52	0,11	3,27	reguláris
$^{16}\text{O}$ $2^+$	13,02	0,16	4,39	reguláris
$^{16}\text{O}$ $2^+$	13,11	0,20	4,46	reguláris
$^{16}\text{O}$ $2^-$	8,87	$10^{-16}$	1,28	irreguláris

A II. táblázatban feltüntettem Wäffler és munkatársai [3] által 1971-ben mért, az  $^{16}\text{O}$   $2^-$  spinparitású állapotból történő irreguláris  $\alpha$ -bomlást is. Ez a bomlás elméleti szempontból különösen fontos s az 5. fejezetben foglalkozom vele. A II. táblázat többi adatát [4]-ből vettem. Ezek a bomlások fontos szerepet játszanak az irreguláris  $\alpha$ -bomlás elméleti értelmezésében.

### 3. AZ $\alpha$ -BOMLÁS ELMÉLETI LEÍRÁSA

#### 3.1. Megmaradási tételek

Az  $\alpha$ -bomlásban felszabaduló energia nem olyan nagymérvű, hogy indokolná a relativisztikus tárgyalásmódot. Mint a magfizikában mindenütt, most is elegendő a nemrelativisztikus tárgyalás.

Vizsgáljuk az

$$(A+4, Z+2) \rightarrow (A, Z) + \alpha$$

bomlást.

Legyen a szülőmag alapállapothoz viszonyított gerjesztési energiája  $E_{\text{gerj}}$ , jelentse  $M$  függvény a megfelelő alapállapotú tömegeket,  $V$  függvény a megfelelő sebességeket. Tegyük fel, hogy a bomlás a leánymag alapállapotába történik és az eseményt a tömegközéppontból szemléljük. Ekkor az energiamegmaradás tételéből

$$\begin{aligned} c^2 M(A+4, Z+2) + E_{\text{gerj}} = \\ = c^2 [M(A, Z) + M(\alpha)] + \frac{1}{2} [M(A, Z) V^2(A, Z) + M(\alpha) V^2(\alpha)], \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

valamint az *impulzus megmaradás* tételéből

$$O = M(A, Z)V(A, Z) + M(\alpha)V(\alpha) \quad (3.1.2)$$

megkapható a kilökődő  $\alpha$ -részecske  $E_\alpha(\text{kin})$  kinetikus energiája

$$E_\alpha(\text{kin}) = \frac{1}{2} M(\alpha)V^2(\alpha) = \frac{c^2[M(A+4, Z+2) - M(A, Z) - M(\alpha)] + E_{\text{gerj}}}{1 + \frac{M(\alpha)}{M(A, Z)}}. \quad (3.1.3)$$

Amennyiben a szülő állapot szélessége  $\Gamma$ , (3.1.3) egyenletből azonnal következik, hogy az  $\alpha$ -részecske spektrumában

$$\Gamma_\alpha = \frac{\Gamma}{1 + \frac{M(\alpha)}{M(A, Z)}} \quad (3.1.4)$$

kiszélesedést fogunk észlelni.

A (3.1.3) képlet akkor érvényes, ha csupasz atommag bomlik el. A laboratóriumban azonban atomok vannak, tehát a pontos kiértékeléshez figyelembe kell venni az atommagot körülvevő elektronfelhő árnyékoló hatását is. Ez kismértékben csökkenti a (3.1.3) alatt felírt energiát

$$E_\alpha(\text{kin}) + \Delta E_\alpha(\text{kin}) \quad (3.1.5)$$

értékre, ahol (ld. [5])

$$\Delta E_\alpha(\text{kin}) = - \frac{65,3Z^{7/5} - 80Z^{2/5}}{1 + \frac{M(\alpha)}{M(A, Z)}} \text{ eV}. \quad (3.1.6)$$

Itt  $Z$  most is a leánymag rendszámát jelenti.

Az *impulzusmomentum* megmaradásának törvénye megköveteli, hogy a kezdeti állapot (anyamag) impulzusmomentuma és annak vetülete megegyezzen a végállapot (leánymag +  $\alpha$ -részecske) összimpulzusmomentumával és vetületével. Mivel az  $\alpha$ -részecske zérus impulzusmomentumú (spinű) részecske, pályamomentumának  $L$  értéke

$$|I_p - I_d| \leq L \leq I_p + I_d \quad (3.1.7)$$

korlátok közé eshet csak. Itt  $I_p$  és  $I_d$  az anyamag, ill. a leánymag teljes impulzusmomentumát jelöli.

A *paritás* megmaradásának törvénye különösen fontos számunkra. Mindaddig, amíg csak nukleáris erők működnek közre egy folyamat létrehozatalában, a paritás őrződik. Tehát a végállapot és a kezdeti állapot paritása megegyezik. Mivel az  $\alpha$ -részecske paritása páros (+1), teljesülnie kell a következő egyenlőségnek:

$$\Pi_p = \Pi_d \cdot (-1)^L \quad (3.1.8)$$

ahol  $\Pi_p$ , illetve  $\Pi_d$  jelenti az anya-, ill. leánymag paritását.



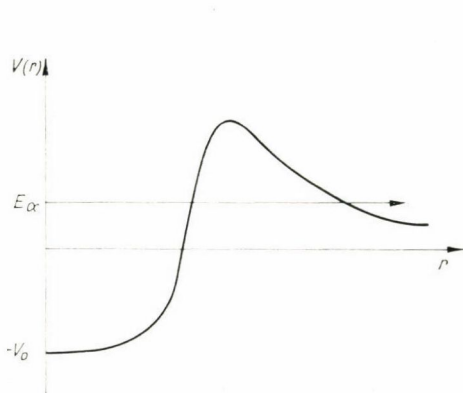
Ebből kiderül, hogy, amennyiben az atommagok paritásai megegyeznek ( $\Pi_p = \Pi_d$ ), az  $L$  pályamomentum csak páros értéket vehet fel, ellenkező esetben  $L$  csak páratlan lehet.

Mindazon esetekben, amikor ettől a szabálytól eltérés van, paritásértéstről beszélünk, és az ilyen  $\alpha$ -bomlást *irreguláris  $\alpha$ -bomlásnak* fogjuk nevezni. Az irreguláris  $\alpha$ -bomlást a paritást őrző nukleáris erők *nem* hozhatják létre, az a paritást nem őrző gyenge nukleon-nukleon erők létezésének következménye.

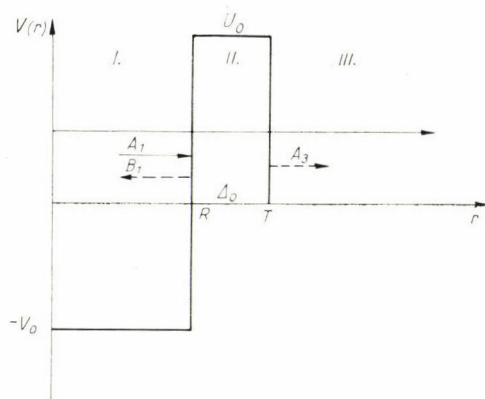
Az irreguláris  $\alpha$ -bomlásokkal az 5. fejezetben foglalkozom részletesen.

### 3.2. Egytest elméletek

Ezeknek az elméleteknek közös vonásuk az, hogy a magot egy gömbszimmetrikus  $V(r)$  potenciállal helyettesítik (3. ábra), s a (szerkezet nélküli) pozitív energiájú  $\alpha$ -részecske mozgását a Schrödinger egyenlet segítségével tárgyalják. A fiatal kvantummechanika első magfizikai alkalmazása, az  $\alpha$ -bomlás egytest elméletének kidolgozása volt. Gamow [6], Condon és Gurney [7] egymástól függetlenül végezték el ezt a munkát 1928-ban. A következőkben az ő gondolatmenetüket ismertetem röviden.



3. ábra



4. ábra

A feladat az, hogy meghatározzuk: mi a valószínűsége annak, hogy egy  $E$  energiájú  $\alpha$ -részecske áthatoljon a 3. ábrán feltüntetett potenciálgáton. A válasz egyben magyarázatot szolgáltat a bomlási állandókban észlelt soknagyságrendes változásra az  $\alpha$ -részecskék energiájának viszonylag konstans volta ellenére.

A feladat megoldását egy egyszerűbb kérdés megvizsgálásával kezdjük. Mi a valószínűsége annak, hogy egy  $E$  energiájú részecske átjusson a 4. ábrán látható derékszögű potenciálgáton keresztül az I. térrészből a III. térrészbe?

A potenciál tehát a következő:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq r < R & \text{I térrész} \\ U_0 & R \leq r < T & \text{II térrész} \\ 0 & T \leq r & \text{III térrész} \end{cases} \quad (3.2.1)$$

A radiális Schrödinger egyenlet  $s$  hullámra ( $l=0$ )

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) - E \right] u(r) = 0, \quad (3.2.2)$$

ahol  $\mu$  a részecske tömege,  $E$  az energiája.

Bevezetve a

$$k_1^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} (E + V_0), \quad -k_2^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U_0), \quad k_3^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E \quad (3.2.3)$$

jelöléseket, a Schrödinger egyenlet és megoldásai a különböző tartományokban a következő egyszerű alakban írhatók

Schrödinger egy.	megoldás	térrész	
$u'' + k_1^2 u = 0$	$u = A_1 e^{ik_1 r} + B_1 e^{-ik_1 r}$	I	(3.2.4a)

$u'' - k_2^2 u = 0$	$u = A_2 e^{k_2 r} + B_2 e^{-k_2 r}$	II	(3.2.4b)
---------------------	--------------------------------------	----	----------

$u'' + k_3^2 u = 0$	$u = A_3 e^{ik_3 r} + B_3 e^{-ik_3 r}$	III	(3.2.4c)
---------------------	--	-----	----------

A (3.2.4c) egyenletben a  $B_3$  amplitúdót zérusnak választjuk, mivel ez a tag egy befutó hullámot jelent, amit a III. tartományban nem engedünk meg.

A potenciál véges szakadási helyein, a Schrödinger egyenletből következően, a hullámfüggvénynek és deriváltjának folytonosnak kell lenni. Ebből négy összefüggést kapunk az öt ismeretlen amplitúdóra.

Az áthaladás  $P_0$ , a visszaverődés  $B_0$  valószínűségét a következő képletek adják:

$$P_0 = \frac{j_{A_3}}{j_{A_1}} = \frac{|A_3|^2 k_3}{|A_1|^2 k_1} \quad (3.2.5)$$

$$B_0 = \frac{j_{B_1}}{j_{A_1}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}, \quad (3.2.6)$$

ahol az  $A_1$ ,  $A_3$  és  $B_1$  indexekkel ellátott mennyiségek rendre a beeső, áthaladó és visszavert áramsűrűségeket jelölik.

Elemi műveletek elvégzése után, az áthaladás  $P_0$  valószínűségére, a 3. ábrán feltüntetett adatokkal kifejezve, a következő egzakt képletet nyerjük

$$P_0 = 16k_1 k_3 k_2^2 \{ (k_1^2 + k_2^2)(k_2^2 + k_3^2)(e^{-2k_2 A_0} + e^{2k_2 A_0}) + 2[(k_1^2 - k_2^2)(k_2^2 - k_3^2) + 4k_1 k_3 k_2^2] \}^{-1}, \quad (3.2.7)$$

ahol a  $A_0 = T - R$  jelölést alkalmaztuk.

Hasonló módon a visszaverődés  $B_0$  valószínűségére

$$B_0 = \frac{16k_1 k_3 k_2^2 / P_0 - 16k_1 k_3 k_2^2}{16k_1 k_3 k_2^2 / P_0} = 1 - P_0 \quad (3.2.8)$$

kifejezést nyerjük, amelyből

$$B_0 + P_0 = 1. \quad (3.2.9)$$



Ez utóbbi egyenlőség azt a tényt fejezi ki, hogy a hullám (részecske) vagy visszaverődik, vagy áthatol a potenciálgáton, harmadik lehetőségre nincs mód.

A továbbiakban csak az áthaladás  $P_0$  valószínűsége után érdeklődünk.

Megvizsgáljuk azt az esetet, amikor a potenciálgát elég vastag és magas, tehát fennáll a

$$\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (U_0 - E)} A_0 \equiv k_2 A_0 \gg 1 \quad (3.2.10)$$

egyenlőtlenség. Ekkor  $P_0$  (3.2.7)-gyel megadott kifejezése jelentős mértékben egyszerűsödik. Nevezetesen, (3.2.7) kapcsos zárójelében levő második tag az első mellett és az első tagban levő negatív exponensű kifejezés a pozitív exponensű mellett elhanyagolható, s így  $P_0$ -ra a

$$P_0 = 16 k_1 k_3 k_2^2 \{ (k_1^2 + k_2^2) (k_2^2 + k_3^2) e^{2k_2 A_0} \}^{-1} \quad (3.2.11)$$

közelítő kifejezést nyerjük. Beírva  $k_1$ ,  $k_2$  és  $k_3$  (3.2.3) alatti definícióját, a  $\mu$  tömegű  $E$  energiájú részecskének a 4. ábrán látható és a (3.2.1)-gyel megadott potenciálgáton való áthatolási valószínűsége ebben az esetben a

$$P_0 = D_0 e^{-2A_0 \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (U_0 - E)}} \quad (3.2.11)$$

kifejezéssel egyenlő, ahol

$$D_0 = 16 \frac{\sqrt{(E + V_0) E} (U_0 - E)}{(U_0 + V_0) U_0}. \quad (3.2.12)$$

Mindezek után könnyű meghatározni adott  $E$  energiával rendelkező  $\alpha$ -részecskének a 3. ábrán látható  $V(r)$  potenciálgáton való áthaladási valószínűségét, az ún. *penetrációs faktort*. A  $V(r)$  potenciált közelíthetjük négyszögpotenciálok összegével az 5. ábrán látható módon.

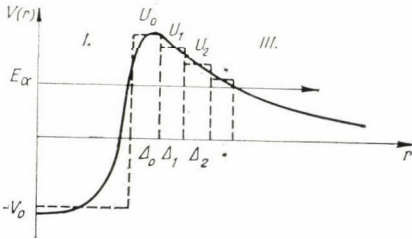
Ha a  $\Delta_i$  intervallumokat megfelelően kicsire választjuk, akkor annak  $P$  valószínűsége, hogy az  $E$  energiájú  $\alpha$ -részecske az I. tartományból átjut a III. tartományba (azaz, hogy az atommag  $\alpha$ -bomlással elbomlik), egyenlő az indexszel ellátott négyszögpotenciálgátakon való áthaladás  $P_i$  valószínűségeinek szorzatával (független események):

$$P = P_0 \cdot P_1 \cdot P_2 \cdots, \quad (3.2.13)$$

ahol  $P_i$  a (3.2.7) egzakt képletből számolandó úgy, hogy a  $k_1$ ,  $k_2$  és  $k_3$  hullámszámokat minden egyes potenciálgátra újraszámoljuk,  $\mu$  helyébe az  $\alpha$ -részecske redukált tömegét (relatív mozgás),  $E$  helyébe az  $\alpha$ -részecske energiáját írjuk.

(3.2.13) ismeretében kiszámolhatjuk egy radioaktív  $\alpha$ -bomló atommag  $\tau$  közepes élettartamát, ami a  $\lambda$  időegységre vonatkoztatott bomlási valószínűség reciproka (l. 2.1. szakasz). Az  $\alpha$ -részecske  $E$  energiája az atommag belsejében kinetikus és potenciális energiájának összege

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - V_0, \quad (3.2.14)$$



5. ábra

ahol  $v$  az  $\alpha$ -részecske sebessége az atommag belsejében. Az  $\alpha$ -részecske másodpercenként  $\frac{v}{2R}$ -szer próbál „kitörni” az  $R$  sugarú potenciálgödörből, mindegyik alkalommal (3.2.13) által adott  $P$  valószínűséggel. Ezért az időegységre vonatkoztatott bomlási valószínűség, illetve a közepes élettartam reciproka

$$\lambda = \frac{1}{\tau} = \frac{v}{2R} P. \quad (3.2.15)$$

(3.2.15) adja meg a bomlásállandónak az  $\alpha$ -részecske energiájától való függését.

Ha a potenciálgát elég magas, hogy teljesüljön (3.2.10) minden  $i$ -edik szeletre, akkor (3.2.15)-öt olyan alakkal közelíthetjük, amely világosan mutatja  $\lambda$   $E$  függésének jellegét. Használhatjuk ekkor ugyanis a (3.2.11) közelítő képletet:

$$P_i = D_i e^{-2A_i \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (U_i - E)}} \quad (3.2.16)$$

és ezt (3.2.13)-ba írva, azt kapjuk, hogy

$$P = \prod_{i=0,1,\dots} D_i e^{-2 \sum_{i=0,1,\dots} A_i \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (U_i - E)}}. \quad (3.2.17)$$

Az exponenciális faktor kitevőjében levő összeget a megfelelő integrállal helyettesítve, az áthatolás valószínűsége

$$P = D e^{-2 \int_R^T \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E)} dr}, \quad (3.2.18)$$

ahol a

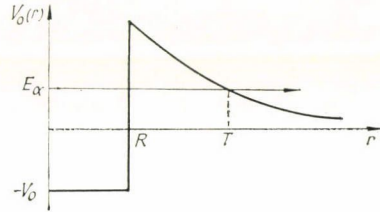
$$D = \prod_{i=0,1,\dots} D_i \quad (3.2.19)$$

faktor az  $E$  energiától kismértékben függ csak, értékét főként a magmodell ( $V(r)$  potenciál alakja) határozza meg.

A bomlásállandó energiafüggésének kvalitatív vizsgálatának érdekében tovább kell specializálódnunk. Hogy a (3.2.18) exponensében szereplő integrált analitikusan kiszámolhassuk, a mag által az  $\alpha$ -részecskére ható potenciált a következő, egyszerűsített alakban vesszük fel (l. 6. ábra)

$$V_0(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq r < R \\ \frac{2(Z-2)e^2}{r} & R \leq r. \end{cases} \quad (3.2.20)$$

Tehát az atommag belsejét konstans vonzó potenciállal helyettesítjük, az atommagon kívül ( $r \geq R$ ) tiszta Coulomb taszítást tételezünk fel ( $Z$  a bomló mag rendszáma).



6. ábra

(3.2.18)-ban a  $V(r)$  függvény a potenciálon kívül a centrifugális gátat  $\left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}\right)$  is tartalmazza, így  $l=0$  esetén  $V(r) = V_0(r)$ . Tehát a zérus relatív impulzummomentumú  $\alpha$ -részecske áthatolási valószínűsége:

$$P = D e^{-2 \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}} I_0}. \quad (3.2.21)$$



ahol az exponensben szereplő  $I_0$  integrál (3.2.20) beírásával már elvégezhető analitikusan. Az eredmény:

$$I_0 = \sqrt{2(Z-2)e^2} \sqrt{T} \left( \arccos \sqrt{\frac{R}{T}} - \sqrt{\frac{R}{T}} \sqrt{1 - \frac{R}{T}} \right). \quad (3.2.22)$$

(3.2.22)  $T$ -n keresztül függ az energiától, ugyanis az 5. ábrából nyilvánvaló módon látszik, hogy

$$T = \frac{2(Z-2)e^2}{E}. \quad (3.2.23)$$

(3.2.15), (3.2.21), (3.2.22) és (3.2.23) felhasználásával a bomlásállandó

$$\lambda = \frac{v}{2R} D \exp \left\{ -\frac{4(Z-2)e^2}{\sqrt{E}} \cdot \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}} \left( \arccos \sqrt{\frac{ER}{2(Z-2)e^2}} - \sqrt{\frac{ER}{2(Z-2)e^2}} \sqrt{1 - \frac{ER}{2(Z-2)e^2}} \right) \right\}. \quad (3.2.24)$$

(3.2.24) megadja a bomlásállandónak az  $\alpha$ -részecske energiájától ( $E$ ), a bomló mag sugarától ( $R$ ) és a rendszámától ( $Z$ ) való függését. A képlet a magas rendszámú természetes  $\alpha$ -sugárzó magok esetén alkalmazható, mert itt várható, hogy közelítőleg teljesül (3.2.10). Az összefüggésben szereplő  $D$  energia függéséről már volt szó (csekély),  $v$ -nek, az  $\alpha$ -részecske atommagbéli sebességének energia függése (3.2.14) miatt szintén jelentéktelen.

Alkalmazzuk a (3.2.24) összefüggést egy átlagos  $\alpha$ -aktív magra, amelyet

$$E_1 = 6 \text{ MeV}, \quad Z = 86, \quad R = 9 \text{ fm} \quad (3.2.25)$$

jellemez. Ezen paraméterek mellett a bomlásállandóra  $\lambda_1$  értéket kapunk. Ha most az  $\alpha$ -részecske energiáját 1 MeV-val  $E_2 = 7$  MeV-re változtatjuk, a kapott  $\lambda_2$  bomlásállandó hat nagyságrenddel megváltozik, azaz

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \sim 10^6. \quad (3.2.26)$$

Ily módon azt látjuk, hogy ez a primitív modell, sok közelítése és feltevése ellenére is, meg tudja magyarázni az előző fejezetben említett kísérleti tapasztalatot: a bomlásállandó soknagyságrendes változását az  $\alpha$ -részecske energiájának viszonylagos állandósága ellenére.

(3.2.24) magyarázatot szolgáltat arra a tényre is, hogy miért észlelünk csak az  $A \geq 210$  tömegszámú tartományban (spontán)  $\alpha$ -aktivitást, holott energetikailag az már  $A > 150$  tömegszámától kezdve lehetséges volna. (3.2.24)-ből látjuk ugyanis, hogy a  $210 > A > 150$  tartományban, az  $\alpha$ -részecske csekély energiája miatt, az áthatolás valószínűsége, s így a bomlásállandó olyan kicsivé válik, hogy a hosszú felezési időtartam miatt a bomlás a gyakorlatban megfigyelhetetlen.

### 3.3. Soktest elméletek

Ezeknek az elméleteknek közös vonásuk az, hogy az *atommag szerkezetét* is figyelembe veszik.

Az  $\alpha$ -bomlás felfogható *reakcióként*, ha a szülő magot úgy tekintjük, mint egy reakció közbenső (compound) állapotát, amely aztán elbomlik az ( $\alpha$ +leánymag) csatornába. Ilyen felfogás mellett az  $\alpha$ -bomlás mikroszkopikus, a magszerkezetet is figyelembe vevő leírására alkalmazható a Wigner és Eisenbud által kidolgozott, magreakciók tárgyalására szolgáló *R-mátrix elmélet* [8]. Az alkalmazás Thomas nevéhez fűződik és a 3.3.1. pontban foglalkozom vele.

Az  $\alpha$ -bomlás, lévén időben végbemenő folyamat, az *időfüggő Schrödinger egyenletből* indulva is tárgyalható. Ez a tárgyalásmód H. J. Mang [10] nevéhez fűződik és a 3.3.2. pontban ismertetem részletesen.

#### 3.3.1. Az $\alpha$ -bomlás *R-mátrix elmélete*

1954-ben Thomas az *R-mátrix* elméletet specializálta  $\alpha$ -bomlásra [9]. Az *R-mátrix* elmélet, amelyet Wigner és Eisenbud állított fel, az

$$A + a \rightarrow \begin{cases} A + a \\ A^* + a \\ B + b \\ C + c \\ \vdots \end{cases} \quad (3.3.1)$$

típusú reakciók, tehát a sokcsatornás, de egy csatornában csak két végterméket létrehozó reakciók soktestproblémás egzakt leírására szolgál. Választ ad arra a kérdésre, hogy a kiinduló ( $A + a$ ) állapot milyen valószínűséggel megy át a (3.3.1) jobb oldalán álló két fragmentumos csatornák valamelyikébe. Az *egzakt* tárgyalásmódon az értendő, hogy az elmélet alapfeltevésein kívül közelítést nem alkalmaz, és alapfeltevései elfogadhatók. Ezek a következők:

- a) alkalmazható a nemrelativisztikus kvantummechanika
- b) a reakció során két termék keletkezik
- c) nincs részecske keltés, ill. abszorpció
- d) létezik egy, ún. csatornasugár, amelyen kívül nincs polarizáló potenciál.

A továbbiakban ismertetem Thomas *R-mátrixos*  $\alpha$ -bomlás elméletét. A tárgyalásmód azonos [11]-gyel.

A reakcióban résztvevő soknukleon rendszert a

$$(H - E)\Psi = 0. \quad (3.3.2)$$

Schrödinger egyenlet által meghatározott  $\Psi$  sokrészecske hullámfüggvény írja le. Tekintsünk először két,  $c$  kvantumszám sorozattal jellemezhető fragmentumot, és írjuk fel a  $\Psi_c$  hullámfüggvényt két hullámfüggvény szorzataként

$$\Psi_c = u_c(r_c)\Phi_c(\xi_c). \quad (3.3.3)$$

Itt az  $r_c$  relatív távolságtól függő  $u_c(r_c)$  radiális hullámfüggvény a fragmentumok relatív mozgását írja le. A  $\xi_c$  belső koordinátáktól függő  $\Phi_c(\xi_c)$  az ún. *csatorna-*



*hullámfüggvény*, amely az  $\mathbf{A}$  és  $\mathbf{a}$  kvantumszámokkal jellemzett fragmentumok belső hullámfüggvényeinek és a relatív szögektől függő gömbfüggvény szorzatából áll, azaz

$$\Phi_c(\xi_c) = \Phi_A(\xi_A)\chi_a(\xi_a)Y_{LM}(\theta_c, \varphi_c). \quad (3.3.4)$$

A teljes konfigurációs teret felosztjuk az  $S$  csatorna felülettel egy külső és belső részre.

A *külső tartományt* a háromdimenziós térben  $r_c \geq a_c$  jellemzi ( $a_c$  a *csatornasugár*), és ebben a térrészben a két fragmentum kölcsönhatása a Coulomb kölcsönhatásra korlátozódik. Így a relatív radiális  $u_c(r_c)$  hullámfüggvényt Coulomb hullámfüggvényekkel lehet kifejezni.

A *belső tartományban*, ahol is a fragmentumok közel vannak egymáshoz,  $\Psi$  nem írható (3.3.3)-hoz hasonló egyszerű módon. Ezért ebben a térrészben definiálunk egy  $X_\lambda$  *diszkrét* teljes függvényrendszert, ahol  $X_\lambda$  kielégíti a

$$(H - E_\lambda) X_\lambda = 0 \quad (3.3.5)$$

Schrödinger-egyenletet és eleget tesz a következő határfeltételnek:

$$\int \Phi_c^* [\nabla_n(r_c X_\lambda) - B_c X_\lambda] dS = 0. \quad (3.3.6)$$

Az integrálást az  $S$  csatornafelületre kell elvégezni,  $B_c$  a logaritmikus derivált *előírt*, valós és energiafüggetlen értéke a csatornafelületen.  $E_\lambda$  valós és diszkrét és a hozzá tartozó  $X_\lambda$  hullámfüggvényt a belső tartományra normaljuk

$$\int X_\lambda^* X_{\lambda'} d\tau = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (3.3.7)$$

A rendszert leíró hullámfüggvényt a *belső tartományban* kifejtjük ezen diszkrét állapotok teljes rendszere szerint

$$\Psi = \sum_\lambda A_\lambda X_\lambda. \quad (3.3.8)$$

Bevezetjük az  $E$  energiától független, valós  $\gamma_{\lambda c}$  *redukált szélesség amplitúdót*, amely annak mértéke, hogy  $X_\lambda$  belső hullámfüggvény milyen mértékben tartalmazza a csatornahullámfüggvényt a csatornafelületen, azaz

$$\gamma_{\lambda c} = \left( \frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} \int \Phi_c^* X_\lambda dS, \quad (3.3.9)$$

ahol  $\mu_c$  a  $c$  csatornában levő két fragmentum redukált tömege.

Bevezetjük továbbá a  $V_c$  és  $D_c$  mennyiségeket, amelyek a teljes belső hullámfüggvénynek, illetve deriváltjának  $\Phi_c$ -vel való átfedését mérik, ily módon

$$V_c = \left( \frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} \int \Phi_c^* \Psi dS \quad (3.3.10)$$

és

$$D_c = \left( \frac{\hbar^2}{2\mu_c a_c} \right)^{1/2} \int \Phi_c^* \nabla_n(r_c \Psi) dS. \quad (3.3.11)$$

Az  $R$ -*mátrix* e két mennyiség között létesít kapcsolatot a következő definíció szerint:

$$V_c = \sum_{c'} R_{cc'} (D_{c'} - B_{c'} V_{c'}). \quad (3.3.12)$$

Megmutatható (l. [8]), hogy az így definiált  $R$ -mátrix sorbafejthető a rendszer  $E$  energiájának függvényeként az

$$R_{cc'} = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda c} \gamma_{\lambda c'}}{E_{\lambda} - E} \quad (3.3.13)$$

alakban.

A (3.3.8)-ban definiált  $A_{\lambda}$  kifejtési együtthatók pedig az

$$A_{\lambda} = \frac{1}{E_{\lambda} - E} \sum_c (D_c - B_c V_c) \gamma_{\lambda c} \quad (3.3.14)$$

alakban állíthatók elő.

Definiáljuk az *ütközési mátrixot* vagy más néven a *szórási mátrixot*, amely szorosabb kapcsolatban áll a kísérleti mennyiségekkel, mint az  $R$ -mátrix. A (3.3.3) egyenletben szereplő  $u_c(r_c)$  relatív hullámfüggvény a radiális Schrödinger egyenlet pozitív energiájú megoldásainak lineárkombinációja. A két megoldás a reguláris ( $F_c$ ) és irreguláris ( $G_c$ ) Coulomb hullámfüggvény. Ebből a két megoldásból képezhető egy  $o_c$  kifutó és egy  $i_c$  befutó hullám

$$o_c(r_c) = G_c(r_c) + iF_c(r_c) \quad (3.3.15)$$

$$i_c(r_c) = G_c(r_c) - iF_c(r_c). \quad (3.3.16)$$

A  $\Psi_c$  csatornahullámfüggvény a külső tartományban felírható az  $o_c$  kifutó és  $i_c$  befutó radiális résszel rendelkező  $O_c$  és  $I_c$  hullámfüggvény lineárkombinációjaként

$$\Psi_c = x_c O_c + y_c I_c. \quad (3.3.17)$$

Az ütközési mátrix tulajdonsága az, hogy kapcsolatot teremt az egységnyi abszolút értékű  $x_c$  és  $y_c$  amplitúdók között a következő módon

$$x_c + \sum_{c'} U_{cc'} y_{c'} = 0. \quad (3.3.18)$$

Ezzel

$$\Psi_c = - \sum_{c'} U_{cc'} y_{c'} O_c + y_c I_c. \quad (3.3.19)$$

Az  $U$  ütközési mátrix egyértelmű, de közvetett kapcsolatban áll az  $R$ -mátrixszal. Az  $R$ -mátrix elmélet szerint (l. [8])

$$U_{cc'} = e^{-i\Phi_c} W_{cc'} e^{-i\Phi_{c'}}, \quad (3.3.20)$$

ahol

$$\operatorname{tg} \Phi_c = \frac{F_c(a_c)}{G_c(a_c)} \quad (3.3.21)$$

és

$$W = 1 + 2iP^{1/2}[1 - R(L - B)]^{-1}RP^{1/2}. \quad (3.3.22)$$

(3.3.22) egy mátrix-egyenlet. A benne szereplő betűk az  $R$  és  $W$  kivételével diagonális mátrixokat jelölnek, nevezetesen az  $L$  *logaritmikus derivált* mátrix egy eleme kifejezhető, mint

$$L_c = S_c + iP_c, \quad (3.3.23)$$



ahol  $P$  neve: *áthatolóképesség* (penetrabilitás), és a

$$P_c = \frac{Q_c}{F_c^2 + G_c^2} \quad (3.3.24)$$

összefüggéssel adható meg ( $Q_c = a_c k_c$ , ahol  $k_c$  a relatív mozgás hullámszáma).

(3.3.23)-ban szereplő  $S_c$  *eltolódási mátrix* definíciója pedig

$$S_c = P_c(F_c F'_c + G_c G'_c). \quad (3.3.25)$$

A következőkben az *egycsatornás* közelítést alkalmazzuk. Ez azt jelenti, hogy az egész konfigurációs térben csak *egyetlen* összefüggő tartomány van megengedve a (3.3.2) által leírt soknukleon rendszer számára. Ilyenkor az  $R$ -,  $W$ - és  $U$ -mátrixból függvények lesznek,  $B$ -,  $L$ -,  $S$ -,  $P$ - diagonális mátrixokból pedig számok.

(3.3.18)-ból látható módon az  $U$  ütközési vagy szórás mátrix unitér. Ezért egycsatornás közelítésben az  $U$  ütközési vagy szórás függvény

$$U = e^{2i\delta} \quad (3.3.26)$$

alakban írható, ahol  $\delta$  a *fáziseltolódás* (hiszen  $U$  éppen a kifutó hullám fázisát módosítja, definíció szerint).  $\delta$  valós szám.

(3.3.20)-ból a  $W$ -függvényre (amely szintén unitér)

$$W = e^{2i\delta_R} = 1 + \frac{2iPR}{1 - R(S - B) - iPR} \quad (3.3.27)$$

alakot kapjuk, ahol  $\delta_R$  valós és az  $R$  függvényből, tehát a belső, a kölcsönhatási tartományból eredő fáziseltolódást jelenti. (3.3.27) második egyenlősége (3.3.22) miatt érvényes.

(3.3.27) második egyenlőségéből

$$\operatorname{tg} \delta_R = \frac{RP}{1 - R(S - B)}. \quad (3.3.28)$$

A teljes fáziseltolódás (3.3.20), (3.3.26) és (3.3.27) miatt

$$\delta = \delta_R - \Phi, \quad (3.3.29)$$

ahol  $\Phi$  a (3.3.21) definícióból leolvasható módon a merev gömbön való szóródás fáziseltolódását reprezentálja.

Ha a rendszer  $E$  teljes energiája közel van a rezonanciaenergiához, akkor az  $U$  függvény jó közelítéssel az

$$U = 1 + \frac{i\Gamma_r}{E_r - E - \frac{1}{2}i\Gamma_r} \quad (3.3.30)$$

alakban írható [8], ahol  $E_r$  a *rezonanciaenergia*,  $\Gamma_r$  pedig a *rezonanciaszélesség*.

(3.3.30)- és (3.3.26)-ból következik, hogy a rezonanciaenergia közelében a fáziseltolódás energia függését

$$\delta(E) = \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{\frac{1}{2}\Gamma_r}{E_r - E}, \quad (3.3.31)$$

energia szerinti deriváltját pedig

$$\delta(E) = \frac{\frac{1}{2} \Gamma_r}{(E_r - E)^2 + \frac{1}{4} \Gamma_r^2} \quad (3.3.32)$$

képletek írják le.

Ezek szerint a rezonanciahelyen a fáziseltolódás

$$\delta(E_r) = \frac{1}{2} \pi \pm m\pi \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3.33)$$

A (3.3.30)-ban bevezetett  $\Gamma_r$  rezonanciaszélesség, kifejezhető a fáziseltolódásnak a rezonanciahelyen vett deriváltjával:

$$\frac{1}{2} \Gamma_r = \frac{1}{\delta(E_r)}, \quad (3.3.34)$$

ami (3.3.32)-ből azonnal következik.

(3.3.34) lehetőséget ad arra, hogy a  $\Gamma_r$  rezonanciaszélességet kifejezzük az  $R$ -függvényben szereplő  $\gamma_\lambda^2$  redukált szélességgel. Mindenekelőtt azt szeretnénk elérni, praktikus okok miatt, hogy az  $E_r$  rezonanciaenergiával egybeessen valamelyik  $E_\lambda$  sajátenergia (l. (3.3.6) egyenlet). Ehhez a  $B$  paramétert kell megfelelően választani. (3.3.13)-ból látható, hogy ha  $E_r$  megegyezik valamelyik  $E_\lambda$  sajátenergiával, akkor

$$\lim_{E \rightarrow E_r} R(E) \rightarrow \infty. \quad (3.3.35)$$

Ezt felhasználva, (3.3.28)-ból következik, hogy

$$B = S + P \operatorname{ctg} \delta_R - \frac{1}{R} \rightarrow S + P \operatorname{ctg} \delta_R. \quad (3.3.36)$$

(3.3.29) és (3.3.33) megadja  $\delta_R$  értékét is

$$\delta_R = \frac{1}{2} \pi \pm m\pi + \Phi \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3.37)$$

Ezt behelyettesítve nyerjük a határfeltétel paraméterre

$$B = S - P \operatorname{tg} \Phi. \quad (3.3.38)$$

Ez az eredmény tovább egyszerűsödik, ha felhasználjuk  $S$ ,  $P$  és  $\Phi$  definícióját, valamint azt, hogy a Coulomb hullámfüggvények Wronski determinánsa

$$GF' - FG' = 1. \quad (3.3.39)$$

Végeredményben

$$B = \varrho \left. \frac{G'}{G} \right|_{r=a}, \quad \varrho = ka. \quad (3.3.40)$$

A továbbiakban ezzel a határfeltétellel dolgozunk, s ezáltal elérjük azt, hogy egy belső állapot energiája egybeesik egy rezonanciaenergiával.



(3.3.34) és (3.3.37) felhasználásával

$$\frac{2}{\Gamma_r} = (\delta_R - \Phi)_{E=E_r}. \quad (3.3.41)$$

$\delta_R$  deriváltját (3.3.28)-ból számoljuk

$$\delta_R = \frac{\frac{\dot{P}}{R} - \dot{P}(S-B) + \frac{\dot{R}}{R^2} P + P\dot{S}}{\left[ \frac{1}{R} - (S-B) \right]^2 + P^2}. \quad (3.3.42)$$

A határátmenetet elvégezve, és kihasználva a (3.3.13) segítségével megkapható

$$\lim_{E \rightarrow E_\lambda} \frac{\dot{R}}{R^2} \rightarrow \frac{1}{\gamma_\lambda^2} \quad (3.3.43)$$

összefüggést, az atommag belsejéből eredő, a magstruktúráról függő fáziseltolódás energia szerinti deriváltja a rezonanciaenergiánál

$$\delta_R(E_R = E_\lambda) = \frac{P\dot{S} - \dot{P}(S-B) + \frac{P}{\gamma_\lambda^2}}{P^2 + (S-B)^2}. \quad (3.3.44)$$

Tehát a rezonanciaszélesség (3.3.41) felhasználásával

$$\Gamma_r = 2 \left( \frac{\frac{P}{\gamma_\lambda^2} + P\dot{S} - \dot{P}(S-B)}{P^2 + (S-B)^2} - \Phi \right)^{-1}. \quad (3.3.45)$$

Megkaptuk tehát a kívánt összefüggést a  $\Gamma_r$  *nívószélesség* és a magszerkezettől, az atommag *belső* tulajdonságaitól függő (l. (3.3.9))  $\gamma_\lambda^2$  *redukált szélesség* között.

A képletben szereplő mennyiségek, amint az a levezetésből kitűnik, az  $r$  radiális koordinátától ( $\alpha$ -részecske és leánymag közti távolság) és az  $E$  energiától függnak. A (3.3.45)-ben szereplő minden mennyiséget az  $r=a$  (csatornasugár) és az  $E=E_r$  (rezonanciaenergia) helyen kell venni. Az  $E_r$  rezonanciaenergiát az  $\alpha$ -részecske (3.1.3) tömegközpontri energiájával azonosítottuk. A csatornasugár *önkéntesen* választott mennyiség, attól a kifejezés értékének nem szabad függni. Azonban (3.3.45) különböző csatornasugarakra különböző szélesség értékeket szolgáltat.

Ez a következők miatt van. A képletben szereplő  $P$ ,  $S$ ,  $\Phi$  és  $B$  mennyiségek az  $\alpha$ -részecskének az atommagon *kívüli* viselkedésétől függnak. Az  $\alpha$ -részecske atommagon *kívüli* mozgását viszont a mag által kialakított potenciáltér határozza meg. A (3.3.45) képlet tiszta Coulomb kölcsönhatást tételez fel, ugyanis Coulomb hullámfüggvényeket használ. A valóságban azonban az atommag és az  $\alpha$ -részecske nukleonjai között nukleáris kölcsönhatás is működik, amely módosítja a tiszta Coulomb potenciálteret. Ily módon módosul az  $\alpha$ -részecske hullámfüggvénye is, amely csak végtelenben lesz Coulomb hullámfüggvényekkel kifejezhető. Az atommag és az  $\alpha$ -részecske közötti potenciált szórás kísérletekből lehet megállapítani (lásd pl. [12]), az optikai modell [13] segítségével. Az így kapott  $U_{\text{opt}}$  *optikai potenciál* valós részét

már felhasználhatjuk arra, hogy meghatározzuk az  $\alpha$ -részecske valódi hullámfüggvényét a

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U_{\text{opt}} - E \right) u(r) = 0 \quad (3.3.46)$$

Schrödinger egyenlet megoldása által. A két lineárisan független  $\bar{F}$  és  $\bar{G}$  megoldás neve: *módosított* reguláris és irreguláris Coulomb hullámfüggvény [14]. Aszimptotikájukat

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \{\bar{F}, \bar{G}\} = \{F, G\} \quad (3.3.47)$$

határozza meg.

Ezen módosított Coulomb hullámfüggvényekkel definiáljuk a megfelelő  $\bar{P}$ ,  $\bar{S}$ ,  $\bar{\Phi}$  és  $\bar{B}$  mennyiségeket oly módon, hogy a bennük szereplő  $F$ , ill.  $G$  mennyiségeket  $\bar{F}$ , ill.  $\bar{G}$  mennyiségekkel helyettesítjük. Ezeket a mennyiségeket használva, az előző gondolatmenettel teljesen analóg módon eljuthatunk az  $\alpha$ -bomlás szélessége és redukált szélessége közötti összefüggéshez

$$\Gamma_r = 2 \left( \frac{\bar{P}}{\gamma_\lambda^2} + \bar{P}\dot{\bar{S}} - \dot{\bar{P}}(\bar{S} - \bar{B}) \right)^{-1} \frac{\dot{\bar{P}}}{\bar{P}^2 + (\bar{S} - \bar{B})^2} - \dot{\bar{\Phi}}. \quad (3.3.48)$$

Ez a kifejezés már csatornasugártól *független* és a tapasztalattal megegyező értéket szolgáltat a szélességre, feltéve, hogy a csatornasugarat az  $U_{\text{opt}}$  optikai potenciálban szereplő nukleáris kölcsönhatás hatósugarán kívül vesszük fel.

A képletben szereplő  $\gamma_\lambda$  *redukált szélesség amplitúdó*, mint (3.3.9) alatti definíciójából látható, azt méri, hogy a  $\lambda$  állapotú anyamag  $X_\lambda$  hullámfüggvényében milyen valószínűséggel található meg az egymástól  $r=a$  relatív távolságra levő leánymag és  $\alpha$ -részecske hullámfüggvénye.  $\gamma_\lambda$  energiafüggését implicit módon az  $X_\lambda$  hullámfüggvény tartalmazza. Ez ugyanis az  $E_\lambda = E_r$  gerjesztési energiájú  $\alpha$ -sugárzó atommag hullámfüggvénye. (A gerjesztési energiát olyan skálán mérjük, amelynek zéruspontja az  $\alpha$ -bomlással szembeni küszöbenergiánál van.)

A  $\gamma_\lambda$  redukált szélesség amplitúdó *elméleti* meghatározása rendkívül bonyolult feladat. Nemcsak azért, mert az anyamag, a leánymag és az  $\alpha$ -részecske sokdimenziós hullámfüggvényeinek ismeretére van szükség, hanem azért is, mert magának az átfedési integrálnak a kiszámítása is nehéz feladat. Ha  $A$ -val jelöljük az anyamag tömegszámát, akkor egy  $3A-1$  dimenziós integrált kell kiszámítani.

(3.3.48) módot nyújt a  $\gamma_\lambda^2$  redukált szélesség *kísérleti* meghatározására. Ha ugyanis  $\Gamma_r$  helyébe a kísérletileg megfigyelt szélességet írjuk és az optikai potenciál (amely szintén kísérleti mennyiség) birtokában pedig (3.3.46) megoldásaiból meghatározzuk a  $\bar{P}$ ,  $\dot{\bar{P}}$ ,  $\bar{S}$ ,  $\dot{\bar{S}}$ ,  $\dot{\bar{\Phi}}$  és  $\bar{B}$  mennyiségeket, akkor a (3.3.48) összefüggés  $\gamma_\lambda^2$ -re megoldható. Mivel a (3.3.48) elméleti összefüggés minden esetben helyes és csatornasugár független értékeket szolgáltatott [11] a tapasztalati szélességekre, ez az eljárás indokolt. Az így kapott redukált szélességet *kísérleti redukált szélességnek* fogjuk nevezni.

A kísérleti redukált szélességeknek az irreguláris  $\alpha$ -bomlás elméletében betöltött szerepéről és az  $^{16}\text{O}$  atommag néhány  $2^+$  spinparitású gerjesztett állapotához tartozó értékeinek meghatározásáról a 4.2.1. pontban lesz bővebben szó.

A következő pontban az  $\alpha$ -bomlás Mang-féle elméletéről lesz szó. *Mang* volt az, aki elsőként fejlesztett ki módszert a redukált szélesség amplitúdó elméleti számolására.



### 3.3.2. Az $\alpha$ -bomlás Mang-féle elmélete

Tekintsünk egy  $A$  nukleonból ( $Z$  protonból és  $N$  neutronból) álló rendszert, amelyet az időfüggő Schrödinger egyenlet segítségével írunk le

$$H\Phi(1, \dots, A, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \quad (3.3.49)$$

ahol a rendszer Hamiltoniját

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^A \Delta_i + V(1, 2, \dots, A) \quad (3.3.50)$$

alakban tételezzük fel. Itt  $V$  a részecskék kölcsönhatásából származó potenciális energia, míg az első tag a részecskék mozgásából eredő kinetikus energia.

Feltesszük, hogy rendszerünk a  $t=0$  időpontban azonos a szülő maggal, azaz

$$\Phi_0(1, \dots, A) \equiv \Phi(1, \dots, A, t=0) = \text{szülő mag} \quad (3.3.51)$$

valamint azt, hogy  $\Phi_0$  ismert.

(3.3.50)-t átírjuk két fragmentumra

$$H = \{H_\alpha + H_d\}_r - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_r + W(\alpha, d), \quad (3.3.52)$$

ahol  $H_\alpha$  az  $\alpha$  részecske belső mozgását írja le,

$H_d$  a leánymag belső mozgását írja le,

$\mathbf{r}$  a fragmentumok tömegközéppontjának relatív távolsága,

$M$  a fragmentumok redukált tömege,

$W$  a fragmentumok közti kölcsönhatási energia.

Tehát a

$$H_\alpha \chi_\alpha^\tau = E_\alpha^\tau \chi_\alpha^\tau. \quad (3.3.53)$$

Schrödinger egyenlet megoldásai adják az  $\alpha$ -részecske állapotait leíró belső hullámfüggvényeket és a hozzájuk tartozó energiákat, a

$$H_d \chi_d^\sigma = E_d^\sigma \chi_d^\sigma \quad (3.3.54)$$

egyenlet pedig a leánymag állapotainak meghatározására szolgál.

A fenti egyenletekben  $\tau$  és  $\sigma$  az állapotok jellemzéséhez szükséges kvantumszámok összességét jelentik.

Fogadjuk el továbbá, hogy  $W(\alpha, d)$  egy egyszerű potenciállal helyettesíthető

$$W(\alpha, d) \sim V(\mathbf{r}) \quad \text{ha} \quad |\mathbf{r}| \cong r_0 \quad (3.3.55)$$

egy bizonyos relatív  $|\mathbf{r}|$  távolságon túl. (3.3.55) pontos értelme a következő: ha  $\chi_\alpha^\tau$  és  $\chi_\alpha^{\tau'}$ , valamint  $\psi_d^\sigma$  és  $\psi_d^{\sigma'}$  kötöttállapotú megoldások, akkor  $|\mathbf{r}| \cong r_0$  esetén igaz a következő:

$$\langle \chi_\alpha^\tau \psi_d^\sigma | W(\alpha, d) | \chi_\alpha^{\tau'} \psi_d^{\sigma'} \rangle = \delta_{\tau\tau'} \delta_{\sigma\sigma'} V(\mathbf{r}). \quad (3.3.56)$$

Mindezekből nyilvánvaló, hogy ésszerű az időfüggő állapotot a következőképp felvenni:

$$\begin{aligned} \Phi(1, \dots, A, t) = & a(t) \Phi_0(1, \dots, A) + \\ & + \sum_{\tau\sigma Lm} \int d\varepsilon b_{\tau\sigma Lm}(\varepsilon, t) \mathcal{A} \{ \chi_\alpha^\tau \psi_d^\sigma \varphi_L(r, \varepsilon) Y_{Lm}(\hat{r}) \}, \end{aligned} \quad (3.3.57)$$

ahol az időfüggést tartalmazó együtthatóknak ki kell elégíteni a következő feltételt

$$a(0) = 1 \quad \text{és} \quad b(\varepsilon, 0) = 0. \quad (3.3.58)$$

A (3.3.57)-es egyenletben szereplő  $\mathcal{A}$  szimbólum antiszimmetrizációt jelöl  $Y_{Lm}(\hat{r})$  az  $\alpha$ -részecske leánymaghoz viszonyított relatív mozgásának szögfüggését írja le, míg  $\varphi_L(r, \varepsilon)$  a radiális mozgását.  $\varphi_L(r, \varepsilon)$  megegyezik a Coulomb hullámfüggvénnyel, mert Mang a következőképpen definiálja

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{L(L+1)}{r^2} + \frac{2(Z-2)e^2}{r} - \varepsilon \right) \varphi_L(r, \varepsilon) = 0, \quad (3.3.59)$$

ahol  $Z$  az anyamag rendszáma.  $\varphi_L$ -re vonatkozó normálás pedig

$$\int \varphi_L(r, \varepsilon) \varphi_L(r, \varepsilon') r^2 dr = \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (3.3.60)$$

(3.3.58) (3.3.49)-be való helyettesítésével az  $a$  és  $b$  időfüggő amplitúdókra akkor nyerünk egyértelmű megoldást, ha megköveteljük, hogy

$$\langle \Phi_0(1, \dots, A) | \sum_{\tau L m} \int d\varepsilon b_{\tau L m}(\varepsilon, t) \mathcal{A} \{ \chi_\alpha^\tau \psi_d^\sigma \varphi_L Y_{Lm} \} \rangle. \quad (3.3.61)$$

$a$  és  $b$  ismeretében (3.3.57) egyértelműen megadja az  $A$  nukleonból álló rendszer időbeli és térbeli viselkedését. Azonban (3.3.57)-ben az összegezés az  $\alpha$ -részecske és leánymag állapotainak teljes rendszerére vonatkozik. Ez azt jelenti, hogy a (3.3.53) és (3.3.54) sokrészecske Schrödinger egyenlet összes megoldására szükség van.

Mang a következő közelítést csinálja: elhanyagolja (3.3.57)-ben azokat a  $\sigma$  állapotokat, amelyek a folytonos, nem kötött tartományba esnek. Ezenkívül  $\tau$ -ra csak egy állapotot vesz figyelembe, nevezetesen az  $\alpha$ -részecske alapállapotát. (3.3.57)-et átírjuk úgy, hogy explicite figyelembe vesszük az impulzusmomentum megmaradását és az előbb említett közelítést. Ekkor

$$\Phi(1, \dots, A, t) = a(t) \Phi_{0J}^M(1, \dots, A) + \sum_{\sigma j L} \int d\varepsilon b_{\sigma j L}(\varepsilon, t) \Phi_{\sigma j L \varepsilon}^M, \quad (3.3.62)$$

ahol a

$$\Phi_{\sigma j L \varepsilon}^M \equiv \mathcal{A} \{ \chi_\alpha \varphi_L(\varepsilon, r) \sum_m C(Lm j M - m | J M) Y_{Lm} \psi_{j M - m}^\sigma \} \quad (3.3.63)$$

jelölést vezettük be. (3.3.62)-ben  $\Phi_{0J}^M$  az anyamag  $J$  impulzusmomentumú,  $M$  vetületű állapotát jelöli. (3.3.63)-ban  $\Psi_{j M - m}^\sigma$  a leánymag  $j$  impulzusmomentumú  $M - m$  vetületű és egyéb,  $\sigma$ -val specifikált kötött állapotát jelenti,  $C$  a vektor összeadási vagy más néven Clebsch—Gordan együttható.

A (3.3.61)-es feltétel is módosul a következőképp:

$$\langle \Phi_{0J}^M | \sum_{\sigma j L} \int d\varepsilon b_{\sigma j L}(\varepsilon, t) | \Phi_{\sigma j L \varepsilon}^M \rangle = 0. \quad (3.3.64)$$

(3.3.62)-öt beírjuk a Schrödinger egyenletbe

$$\begin{aligned} a(t) H \Phi_{0J}^M + \sum_{\sigma j L} \int d\varepsilon b_{\sigma j L}(\varepsilon, t) H \Phi_{\sigma j L \varepsilon}^M &= \\ = i \hbar \dot{a}(t) \Phi_{0J}^M + i \hbar \sum_{\sigma j L} \int d\varepsilon \dot{b}_{\sigma j L}(\varepsilon, t) \Phi_{\sigma j L \varepsilon}^M. \end{aligned} \quad (3.3.65)$$



(3.3.65)-öt beszorozzuk  $\Phi_{0J}^{M*}$  és  $\Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^{M*}$  függvényekkel és integráljuk az így kapott egyenletet a teljes konfigurációs térre. Ekkor az  $a$  és  $b$  amplitúdókra egy csatolt differenciálegyenletrendszer kapunk:

$$\begin{aligned} a(t) \langle \Phi_{0J}^M | H | \Phi_{0J}^M \rangle + \sum_{\sigma jL} \int d\varepsilon b_{\sigma jL}(\varepsilon, t) \langle \Phi_{0J}^M | H | \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M \rangle = \\ = i\hbar \dot{a}(t) \langle \Phi_{0J}^M | \Phi_{0J}^M \rangle + i\hbar \langle \Phi_{0J}^M | \sum_{\sigma jL} \int d\varepsilon b_{\sigma jL}(\varepsilon, t) \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M \rangle \end{aligned} \quad (3.3.66a)$$

és

$$\begin{aligned} a(t) \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | H | \Phi_{0J}^M \rangle + \sum_{\sigma' j' L'} \int d\varepsilon' b_{\sigma' j' L'}(\varepsilon', t) \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | H | \Phi_{J\sigma' j' L' \varepsilon'}^M \rangle = \\ = i\hbar \dot{a}(t) \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | \Phi_{0J}^M \rangle + i\hbar \sum_{\sigma' j' L'} \int d\varepsilon' b_{\sigma' j' L'}(\varepsilon', t) \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | \Phi_{J\sigma' j' L' \varepsilon'}^M \rangle. \end{aligned} \quad (3.3.66b)$$

Ezen csatolt differenciálegyenletrendszer egyszerűbbé tételének érdekében a következőket tesszük.

(3.3.66a) bal oldalának első tagjában levő várható értéket  $E_0$ -val jelöljük

$$E_0 = \langle \Phi_{0J}^M | H | \Phi_{0J}^M \rangle. \quad (3.3.67)$$

( $\Phi_{0J}^M$  természetesen nem sajátállapota  $H$ -nak; ez esetben ugyanis a rendszer sohasem bomlana el a  $\Phi_{0J}^M$  állapotból) (3.3.66a) bal oldalának második tagjához hozzáadunk zérust egy  $E_0$ -al megszorozott (3.3.64) formájában.

(3.3.66a) jobb oldalán az első tagban szereplő átfedési integrál értéke 1, a második tag értéke (3.3.64) miatt zérus.

(3.3.66b) bal oldalán levő második tagot egyszerűbb alakra hozhatjuk, ha az  $\alpha$ -részecske és leánymag közti kölcsönhatást elhanyagoljuk, azaz feltesszük a következőt:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | H | \Phi_{J\sigma' j' L' \varepsilon'}^M \rangle \approx \\ \approx \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | \{H_\alpha + H_d\}_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{2(Z-2)e^2}{r} | \Phi_{J\sigma' j' L' \varepsilon'}^M \rangle = \\ = (E_\alpha + E_d^{\sigma'} + \varepsilon') \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{LL'} \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \end{aligned} \quad (3.3.68)$$

ahol  $E_\alpha$  és  $E_d^{\sigma'}$  az  $\alpha$ -részecske és a  $\sigma'$  állapotban levő leánymag kötési energiája.

(3.3.68) segítségével (3.3.66b) bal oldalának második tagja jelentősen egyszerűsödik:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma' j' L'} \int d\varepsilon' b_{\sigma' j' L'}(\varepsilon', t) \langle \Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M | H | \Phi_{J\sigma' j' L' \varepsilon'}^M \rangle \approx \\ \approx (E_\alpha + E_d^\sigma + \varepsilon) b_{\sigma jL}(\varepsilon, t). \end{aligned} \quad (3.3.69)$$

(3.3.66b) jobb oldalának második tagja pedig a  $\Phi_{J\sigma jL\varepsilon}^M$  állapotok ortonormáltsága miatt

$$i\hbar \sum_{\sigma' j' L'} \int d\varepsilon' b_{\sigma' j' L'}(\varepsilon', t) \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{jj'} \delta_{LL'} \delta(\varepsilon - \varepsilon') = i\hbar b_{\sigma jL}(\varepsilon, t) \quad (3.3.70)$$

alakra egyszerűsödik.

Mindezek miatt (3.3.66a) és (3.3.66b) a következő módon írható

$$i\hbar\dot{a}(t) = a(t)E_0 + \sum_{\sigma jL} \int d\varepsilon b_{\sigma jL}(\varepsilon, t) \langle \Phi_{0J}^M | H - E_0 | \Phi_{\sigma jL\varepsilon}^M \rangle, \quad (3.3.71a)$$

$$\begin{aligned} & i\hbar\dot{b}_{\sigma jL}(\varepsilon, t) + i\hbar\dot{a}(t) \langle \Phi_{\sigma jL\varepsilon}^M | \Phi_{0J}^M \rangle = \\ & = b_{\sigma jL}(\varepsilon, t) (E_x + E_d^\sigma + \varepsilon) + a(t) \langle \Phi_{\sigma jL\varepsilon}^M | H | \Phi_{0J}^M \rangle. \end{aligned} \quad (3.3.71b)$$

A (3.3.71) egyenletrendszer a (3.3.58) kezdeti feltételekkel együtt egyértelműen meghatározza az  $a$  és  $b$  amplitúdókat. (3.3.71) *Mang* által adott megoldása [15] a következő:

$$a(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + F - ig)t} \quad (3.3.72a)$$

$$b_{\sigma jL}(\varepsilon, t) = \langle \Phi_{0J}^M | H - E_0 | \Phi_{\sigma jL\varepsilon}^M \rangle \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + F - ig)t} - e^{\frac{i}{\hbar}(E_d^\sigma + E_x + \varepsilon)t}}{E_0 + F - (E_d^\sigma + E_x + \varepsilon) - ig}, \quad (3.3.72b)$$

ahol

$$g = \pi \sum_{j\sigma L} \frac{\hbar^2}{2M} \left| G_{j\sigma L}^J(r) \frac{\partial \varphi_L(\varepsilon, r)}{\partial r} - \varphi_L(\varepsilon, r) \frac{\partial G_{j\sigma L}^J(r)}{\partial r} \right|^2. \quad (3.3.73)$$

$F$ -re  $g$ -hez hasonló kifejezés létezik, azonban bennünket elsősorban  $g$  érdekel, mert ez áll szoros kapcsolatban az atommag bomlásállandójával. Az  $a(t)$  amplitúdó mutatja meg ugyanis azt, hogy a rendszer teljes hullámfüggvényének a szülőmagot leíró része hogyan változik időben. (3.3.72a)-ból látjuk, hogy a szülőmagnak a teljes hullámfüggvényben való megtalálási valószínűsége exponenciálisan csökken az idővel. Ezért a szülőmag bomlásállandója (2.1.5) szerint

$$\lambda = \frac{2g}{\hbar} = \frac{\Gamma}{\hbar}. \quad (3.3.74)$$

Itt  $\Gamma$  a bomló állapot szélessége.

A (3.3.73)-ban szereplő  $G(r)$  függvény definíciója

$$G_{j\sigma L}^J = \int \Phi_{0J}^{M*} \chi_\alpha(\xi_\alpha) \sum_m C(LmjM - m | JM) Y_{Lm}(\hat{r}) \psi_{jM-m}^\sigma(\xi_d) d\xi_\alpha d\xi_d d\hat{r}. \quad (3.3.75)$$

(3.3.9)-cel való összevetésből azonnal látszik, hogy az ott definiált redukált szélességi amplitúdó  $G$ -vel a következő kapcsolatban áll

$$\gamma(r) = \left( \frac{\hbar^2}{2Mr} \right)^{1/2} rG(r). \quad (3.3.76)$$

*Mang* végső közelítésként a  $\varphi_L$  hullámfüggvény *WKB* közelítését [16] használja. Ezzel a bomlás szélességére a

$$\Gamma = \sum_L T_L(\varepsilon_0, r_0) \sum_{j\sigma} \delta_{j\sigma L}^2(\varepsilon_0, r_0) \quad (3.3.77)$$

kifejezést nyeri, ahol az első tényező

$$T_L(\varepsilon_0, r_0) = e^{-\int_{r_0}^{r_u} q_L(r, \varepsilon_0) dr}. \quad (3.3.78)$$

Itt

$$q_L(r, \varepsilon_0) = \left[ \frac{2M}{\hbar^2} \left( \frac{2(Z-2)e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{L(L+1)}{r^2} - \varepsilon_0 \right) \right]^{1/2} \quad (3.3.79)$$

és az  $r_u$  integrálási határt a

$$q_L(r_u) = 0 \quad (3.3.80)$$

egyenletből kell meghatározni.  $\varepsilon_0$  az  $\alpha$ -részecske energiájával egyenlő.

A  $T_L$  mennyiséget a Mang elméletben penetrációs faktornak nevezik, tekintettel az egytest modell hasonló alakú (3.2.18) alatt található áthatolási valószínűségére.

A (3.3.77) szélesség második tényezője egy összeg, amelynek egy tagját a

$$\delta_{j\sigma L}^2(\varepsilon_0, r_0) = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{2q_L(r_0, \varepsilon_0)} |r_0 G_{j\sigma L}'(r_0) + (1 - r_0 q_L(r_0, \varepsilon_0)) G_{j\sigma L}^J(r_0)|^2 \quad (3.3.81)$$

kifejezés adja, ahol a vessző az  $r$  relatív távolság szerinti derivált függvényt jelenti.

$\delta^2$  tartalmazza az összes magszerkezeti információt, de ezenfelül még a külső viszonyoktól (potenciál,  $\alpha$ -részecske energia) is függ. A Mang elméletben ezt a mennyiséget nevezik redukált szélességnek, mi azonban redukált szélességen továbbra is a  $\gamma^2$  mennyiséget fogjuk érteni.

A Mang-féle  $\alpha$ -bomlás elmélet (3.3.77) végeredménye tehát rendkívül szemléletes: ahhoz, hogy az atommag  $\alpha$ -bomlással elbomoljon, szükség van egy  $\alpha$ -részecske formálódási folyamatra, amely  $\sum \delta_{j\sigma L}^2$  valószínűséggel megy végbe; a keletkezett  $\alpha$ -részecskének át is kell jutni a potenciálgáton, ami  $T$  valószínűséggel következik be.

Konkrét számítások [10] azt mutatják, hogy ez a szemléletes kép csak relatív értelemben igaz: a bomlási valószínűségek viszonya egyezik csak meg a tapasztalati értékek viszonyaival.

*Mang* fő érdeme, hogy oszcillátor héjmodell közelítésben kiszámította a (3.3.75) alatt található átfedési integrált [15]. Ez az integrál minden soktestproblémás  $\alpha$ -bomlás elméletnek szerves része, mivel ebben a mennyiségben található az összes magszerkezeti információ.

A fejezet hátralevő részében a (3.3.75) átfedési integrál kiszámításának menetét vázolom röviden.

Oszcillátor héjmodell esetén az anyamag  $\Phi_{0J}^M$  és a leánymag  $\psi_{jM-m}^\sigma$  hullámfüggvénye egy  $A \cdot A$ , ill.  $(A-4) \cdot (A-4)$  méretű determináns. A determinánsok elemei a

$$\varphi_{mj}^m(\mathbf{r}) = NL_n^{l+1/2}(\alpha r^2) (\sqrt{\alpha} r)^l \sum_{\mu} C \left( l\mu \frac{1}{2} m - \mu |jm \right) Y_{l\mu}(\hat{r}) \chi_{1/2m-\mu}(s) \quad (3.3.82)$$

egyrészecskehullámfüggvények, ahol  $N$  a normálási állandó,  $L_n^{l+1/2}$  az asszociált Laguerre-polinom,  $\alpha$  az oszcillátor paraméter  $\chi_{1/2m-\mu}$  pedig a spinfüggvény jele.



Ha feltesszük azt, hogy a szülőmag ( $\Phi_{0J}^M$ ) és leánymag ( $\psi_{JM-m}^g$ ) tömegközéppontja azonos (nincs visszalökődés), akkor (3.3.75)-ben a leánymag koordinátáira  $A-4$  vektorváltozóra elvégezhető az integrálás. Ekkor a probléma egy

$$\int \{\varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \varphi_3(\mathbf{r}_3) \varphi_4(\mathbf{r}_4)\}_J \chi_\alpha(\xi_\alpha) Y_{Lm}(\hat{r}) d\xi_\alpha d\hat{r} \quad (3.3.83)$$

integrál kiszámítására redukálódik, ahol 1 és 2 protont 3 és 4 neutron jelöl.

Az  $\alpha$ -részecske belső hullámfüggvénye már régóta jól ismeretes [17]:

$$\chi_\alpha = \left( \frac{2\beta^{3/2}}{\frac{1}{2}! 4\pi} \right)^{3/2} \chi_0^0(s_1 s_2) \chi_0^0(s_3 s_4) e^{-\frac{\beta}{2}(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2)}, \quad (3.3.84)$$

ahol  $\chi_0^0$  szingulett kétrészecske spinfüggvényt jelöl,  $\beta=0,625 \text{ fm}^{-2}$ , és a  $\xi_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) belső koordináták, valamint az  $\mathbf{r}_i$  ( $i=1, 2, 3, 4$ ) individuális koordináták közti összefüggés:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ \xi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \\ \xi_3 &= \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4). \end{aligned} \quad (3.3.85)$$

A (3.3.83) integrál kiszámításához szükség van a kapcsos zárójelen belüli *csatolási rend* ismeretére, valamint az egyrészecskehullámfüggvények individuális koordinátáinak

$$\{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4\} \rightarrow \{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \mathbf{r}\} \quad (3.3.86)$$

relatív és tömegközépponti rendszerbe való *transzformációjára*. Az  $\alpha$ -részecske  $\mathbf{r}$  tömegközéppontja

$$\mathbf{r} = \frac{1}{4}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4) \quad (3.3.87)$$

megadja az  $\alpha$ -részecske helyét az anyamagtól mérve.

Mang *kétféle* csatolás esetén számolta ki a (3.3.83) integrált.

Egyik esetben a csatolás sorrendje

$$[(j_1 j_2) j_P, (j_3 j_4) j_N]_J. \quad (3.3.88)$$

Tehát először összecsatoljuk a protonokat és a neutronokat  $j_P$ , ill.  $j_N$  impulzusmomentummá, majd ezeket  $J$  eredővé. Ekkor (3.3.75)-re a következő kifejezés adódott [15]

$$G(r) = \left( \frac{2\sqrt{\alpha}}{\frac{1}{2}!} \right)^{3/2} \frac{1}{2} (-1)^{l_2 + \frac{1}{2} - j_1 - j_P + l_4 + \frac{1}{2} - j_3 - j_N}$$

$$\begin{aligned}
& \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{j}_3 \hat{j}_4 W \left( j_1 l_1 j_2 l_2; \frac{1}{2} j_P \right) W \left( j_3 l_3 j_4 l_4; \frac{1}{2} j_N \right) \\
& \sum_{N n_1 n_2} B(v_1 l_1 v_2 l_2; N_1 j_P n_1 0) B(v_3 l_3 v_4 l_4; N_2 j_N n_2 0) \\
& B(N_1 j_P N_2 j_N; N L n_3 0) \left( \frac{\left( n_1 + \frac{1}{2} \right)! \left( n_2 + \frac{1}{2} \right)! \left( n_3 + \frac{1}{2} \right)!}{n_1! n_2! n_3!} \right)^{1/2} \\
& \left( \frac{A}{A-4} \right)^{N+(L/2)} \left( \frac{2\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha+\beta} \right)^{9/2} \left( \frac{\beta-\alpha}{\beta+\alpha} \right)^{N_m-N} \left( \frac{2N!}{\left( N+L+\frac{1}{2} \right)} \right)^{1/2} \quad (3.3.89) \\
& (\sqrt{\alpha} 2r)^L L_N^{L+(1/2)} (4\alpha r^2) e^{-2\alpha r^2},
\end{aligned}$$

ahol  $v_i l_i j_i$  ( $i=1, 2, 3, 4$ ) az  $i$ -edik részecske kvantumszámait jelöli,  $W$  a Racah együttható [18], amely három impulzuszómomentum csatolásánál lép fel,  $\hat{j} \equiv \sqrt{2j+1}$ ,  $L$  az  $\alpha$ -részecske impulzuszómomentuma.

Az összegzésnek az energiamegmaradás szab határt, ugyanis az összegző kvantumszámokra fenn kell álljon

$$n_1 + n_2 + n_3 = N_m - N$$

$$2N_m + L = \sum_{i=1}^4 (2v_i + l_i) \quad (3.3.90)$$

$$2N_1 + j_P + 2n_1 = 2(v_1 + v_2) + l_1 + l_2$$

$$2N_2 + j_N + 2n_2 = 2(v_3 + v_4) + l_3 + l_4.$$

A  $B$  együtthatók a (3.3.86)-os transzformáció miatt lépnek fel és a következő képlettel adhatók meg:

$$\begin{aligned}
& B(N_1 L_1 N_2 L_2; N L N' 0) = \\
& = (-1)^{N_1+N_2+N+N'} \left( \frac{N_1! N_2! \left( N_1 + L_1 + \frac{1}{2} \right)! \left( N_2 + L_2 + \frac{1}{2} \right)!}{N! N'! \left( N + L + \frac{1}{2} \right)! \left( N' + \frac{1}{2} \right)!} \right)^{1/2} \\
& \sum_{v_1 v l \lambda} (-1)^{N+v_1} 2^{-N-N'-(L/2)} \begin{pmatrix} N \\ v_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N' \\ v-v_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ v+2N_1+L_1-\lambda-N-N' \end{pmatrix} \\
& \frac{1}{2}! (N+N'-v)! \\
& \left( \frac{N+N'-l-v}{2} \right)! \left( \frac{N+N'+l-v+1}{2} \right)! \hat{L} \hat{l}^2 \sqrt{\frac{(2L)}{(2\lambda)}} \quad (3.3.91) \\
& C(l 0 \lambda 0 | L_1 0) C(l 0 L - \lambda 0 | L_2 0) W(L_1 \lambda L_2 \lambda L - \lambda; l L),
\end{aligned}$$

ahol a  $v$  és  $v_1$  összegzőindexeknek a

$$\left. \begin{aligned} v + 2N_1 + L_1 - \lambda - N - N' &= \text{páros szám} \\ N + N' - l - v &= \text{pozitív páros szám} \end{aligned} \right\} \quad (3.3.92)$$

feltételek, az  $l$  és  $\lambda$  indexeknek pedig a Clebsh- és Racah-együtthatók szabnak határt.

Második esetben a csatolás sorrendje

$$\{(j_1 j_2) j_P, j_3\} I, j_4\}_J. \quad (3.3.93)$$

Itt először a két protont csatoljuk össze, majd ehhez az egyik neutron s az így kapott  $I$  impulzusmomentumhoz a másik neutron csatoljuk, hogy eredményül  $J$ -t kapjunk. Erre az esetre a (3.3.75) átfedési integrál egy

$$(-1)^{j_N + j_P - L + 2j_3} j_N \hat{L} W(j_N L j_3 I; j_P j_4) \quad (3.3.94)$$

szorzótényezőtől eltekintve megegyezik a (3.3.89)-es képlettel.

A (3.3.89)-es képlet és annak (3.3.94)-gyel módosított változata a továbbiakban nagyon fontos lesz számunkra. Ezzel lehet ugyanis redukált szélesség amplitúdókat számolni, amelyek pontos, *előjeles* értékeire az irreguláris  $\alpha$ -bomlás elméletében (5. fejezet) nagy szükség van.

A következő fejezetben (3.3.48) és (3.3.89)-es képletekkel végzett számítási eredményeimet ismertetem.

## 4. SZÁMÍTÁSI EREDMÉNYEK A REGULÁRIS $\alpha$ -BOMLÁSOKRA VONATKOZÓAN

### 4.1. Nehéz atommagok bomlása

#### 4.1.1. A $^{212}\text{Po}$ atommag izomer állapotának szerkezete

1962-ben *Perlman* és munkatársai, a  $^{212}\text{Po}$  atommag  $\alpha$ -bomlását tanulmányozva, különös jelenségre figyeltek fel. A  $^{212}\text{Po}$  atommag 45 s felezési idejű 2,93 MeV energiájú izomer állapotának  $\alpha$ -bomlása óriási,  $10^{13}$  nagyságrendű *tiltási* (hindrance) *faktossal* rendelkezik (l. a 7. ábrát és [19]-t). A tiltási faktor annak mértéke, hogy mennyire marad el a szélesség *mért* értéke az egytest modellel\* alapállapotból alapállapotba vezető bomlásra végzett *számított* értéktől [5].

1962-ig még sohasem észleltek  $10^3$ -nál nagyobb tiltási faktossal rendelkező  $\alpha$ -bomlást. A  $^{212}\text{Po}$  atommag izomer állapotának ezen óriási tiltási faktorát csak az állapot valamilyen extrém konfigurációjával lehet megmagyarázni. Ugyanakkor a tiltási faktor annál nagyobb, minél nagyobb  $L$  pályamomentummal rendelkezik az emittálódó  $\alpha$ -részecske. Ez a tapasztalati tény azonnal megérthető, ha a potenciál kifejezésében szereplő  $L(L+1)$ -es szorzótényezővel rendelkező centrifugális tagra gondolunk. Ez a tag magas  $L$  értékekre erősen megnöveli a potenciálgát magasságát, ami viszont nagymértékben lecsökkenti az emisszió valószínűségét. A

$$h = h(L) \quad (4.1.1)$$

tapasztalati összefüggésből *Perlman* az izomer állapot spinjére  $J=18$  értéket jósolt [19].

\* A (3.2.24)-es képlet, (2.1.4) alkalmazásával.



A  $^{212}\text{Po}$  atommagban két protonnal és két neutronnal van több, mint a kétszeresen mágikus  $^{208}\text{Pb}$  atommagban. A  $^{209}_{82}\text{Pb}$  és  $^{209}_{83}\text{Bi}$  atommagok spinjéből megtudható, hogy protonokra az  $1h9/2$ , neutronokra a  $2g9/2$  héj kezd feltöltődni.

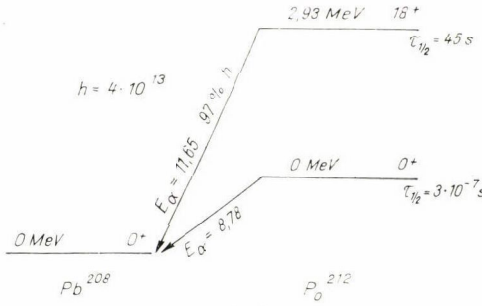
Így a  $^{212}\text{Po}$  utolsó négy nukleonjának alapállapotban a

$$[(1h9/2)_0^2 (2g9/2)_0^2] \quad (4.1.2)$$

konfiguráció fel meg.

Ez a konfiguráció az  $\alpha$ -bomlás szempontjából *maximálisan*  $J=16$  impulzusmomentumú állapottá csatolódhat át. (A paritás megmaradása miatt az  $\alpha$ -részecske  $L$  pályamomentumának párosnak kell lennie, másrészt  $L=J$  is fennáll.)

Ha elfogadjuk *Perlman*  $J=18$ -as értékét a  $^{212m}\text{Po}$  2,93 MeV-os izomer



7. ábra

állapotára, akkor — az előbbiek szerint — az izomer állapot 18-as spinje nem magyarázható egyszerűen a (4.1.2) alapkonzfiguráció átcsatolódásával.  $J=18$  impulzusmomentumú állapot csak úgy jöhet létre, ha a nukleonok más héjakba rendeződnek át.

*Perlman* az

$$[(1h9/2)_8^2 (1i11/2)_{10}^4]_{18}^4 \quad (4.1.3)$$

konfigurációt javasolta az izomer állapot szerkezetére.

A  $^{212m}\text{Po}$  2,93 MeV-os izomer állapot hosszú (45 s!) életét magas impulzusmomentumának és alacsony gerjesztési energiájának köszönheti. A 2,93 MeV-os szint alatt  $J=4$  a legmagasabb impulzusmomentumú állapot, így az izomer állapot csak  $\alpha$ -bomlással szabadulhat meg gerjesztési energiájától és magas spinjétől. Az  $\alpha$ -bomlás valószínűsége viszont, ilyen magas impulzusmomentum esetén, nagyon kicsi.

1962-ben *Glendenning* [20] négyrészes héjmodell számolást végzett a  $^{212}\text{Po}$  atommagra. Három különböző konfigurációt vizsgált meg. Ezek közül kettő az előzőleg említett (4.1.2) és (4.1.3) konfiguráció rögzítettlen csatolásokkal

$$[(1h9/2)_{j_P}^2 (2g9/2)_{j_N}^2]_J^4, \quad (4.1.4)$$

$$[(1h9/2)_{j_P}^2 (1i11/2)_{j_N}^2]_J^4, \quad (4.1.5)$$

míg harmadikként a

$$[(1h9/2)_{j_P}^2 (1j15/2)_{j_N}^2]_J^4 \quad (4.1.6)$$

konfigurációt vette a legkülső két proton és neutron számára.

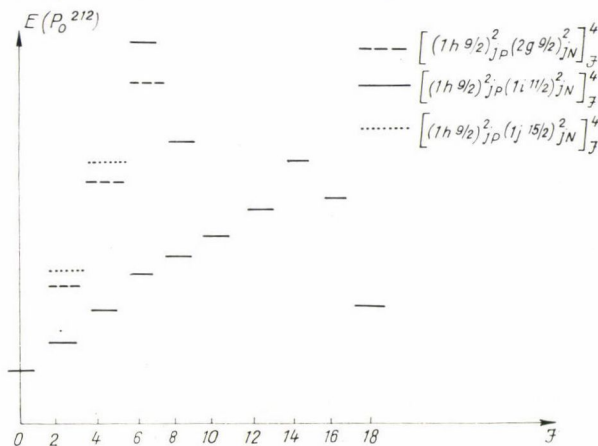
A héjmodell számolás egy adott konfigurációra, eredményként, a különböző  $J$  teljes impulzusmomentumú (gerjesztett) állapot energiáját szolgáltatja. A 8. ábrán látható *Glendenning* számításának eredménye. Ebből kiderül, hogy a héjszerkezet a (4.1.5) konfiguráció eredményeképpen olyan effektust produkál, ami erősen lecsökkenti a  $J=18$  impulzusmomentumú állapot energiáját. *Perlman* eredeti feltevését tehát a héjmodellszámítás igazolta.

Igen érdekes megvizsgálni, előnyben részesíti-e valamelyik konfigurációt az  $\alpha$ -bomlás elmélete.

Ennek érdekében számolást végeztem *Mang* (3.3.77)-es képletével a  $^{212}\text{Po}$  (4.1.2) alapállapotú és a  $^{212m}\text{Po}$  izomer három lehetséges konfigurációjával. Ez a három konfiguráció a korábban már felírt (4.1.3)-as és a  $J=16$ -tal (maximális impulzusmomentummal) vett (4.1.4)-es elrendeződés, valamint a

$$[(1h\ 9/2)_8^2 (2g\ 9/2\ 1i\ 11/2)_{10}^2]_{18}^4 \quad (4.1.6a)$$

struktúra. A részletes számolási eredmények a IIIb. táblázatban találhatók, míg a IIIa. táblázatban egy korábbi számolással [21] vettem össze eredményeimet. Az eltérés abból adódik, hogy [21] más magmodellt használt. ( $A$ ,  $B$ , és  $C$  a  $^{212}\text{Po}$  különböző konfigurációit jelentik; vö. IIIb. táblázattal.)



8. ábra

IIIa. TÁBLÁZAT

$\Gamma_A/\Gamma_B$	$\Gamma_A/\Gamma_B$ [21]	$\Gamma_B/\Gamma_C$	$\Gamma_B/\Gamma_C$ [21]	$\Gamma_A/\Gamma_C$	$\Gamma_A/\Gamma_C$ [21]
$0,59 \cdot 10^{-2}$	$1,50 \cdot 10^{-2}$	$2,88 \cdot 10^{-2}$	$2,23 \cdot 10^{-2}$	$1,71 \cdot 10^{-4}$	$3,43 \cdot 10^{-4}$

IIIb. TÁBLÁZAT

Részletes számítási eredmény a  $^{212m}\text{Po}$  szerkezetének vizsgálatához. Jól látható, hogy a  $B$  konfigurációról  $A$ -ra való áttérés a szerkezeti információt tartalmazó  $\delta^2$  mennyiségben  $\sim 5 \cdot 10^{-3}$  mértékű csökkenést eredményez. Az atommag szerkezetének tehát döntő befolyása van a nívó szélességére.

A kísérlet  $\Gamma_X/\Gamma_0$  arányhoz az  $A$  konfigurációval kapott eredmény áll a legközelebb.  $r=9,0$  fm.

$X$	Konfiguráció	$G'(r)$	$r/(1-rq)$	$G(r)$	$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(1-qr)^2}{2q}$	$\delta^2$	$T$	$\Gamma_X$ [MeV]
$C$	$[(1h\ 9/2)_8^2 (2g\ 9/2)_8^2]_{16}^4$	-0,103	-0,423	0,0295	483	2,34	$1,91 \cdot 10^{-16}$	$4,47 \cdot 10^{-16}$
$B$	$[(1h\ 9/2)_8^2 \times (2g\ 9/2\ 1i\ 11/2)_{10}^2]_{18}^4$	0,140	-0,395	-0,0389	519	4,61	$3,05 \cdot 10^{-18}$	$1,31 \cdot 10^{-17}$
$A$	$[(1h\ 9/2)_8^2 (1i\ 11/2)_{10}^2]_{18}^4$	-0,0104	-0,395	0,00286	519	0,0252	$3,05 \cdot 10^{-18}$	$7,69 \cdot 10^{-20}$
$0$	$[(1h\ 9/2)_6^2 (2g\ 9/2)_6^2]_6^4$	-0,0138	-0,586	0,00453	343	0,0546	$4,91 \cdot 10^{-14}$	$2,68 \cdot 10^{-15}$

A számításból kiderül, hogy az  $\alpha$ -bomlás elmélete a (4.1.5) konfigurációt favorizálja  $J=18$  csatolódással. Ez összhangban van a korábbi elméleti héjmodell számolással [20], ezért kijelenthetjük, hogy a  $^{212}\text{Po}$  atommag 2,93 MeV energiájú gerjesztett állapota  $18^+$  spinparitás értékkel rendelkezik, valamint utolsó négy nukleonjának legvalószínűbb elrendeződése  $[(1h9/2)_8^2(1i11/2)_{10}^2]_{18}^4$ .

Látjuk tehát, hogy az  $\alpha$ -bomlás elméletét felhasználhatjuk arra, hogy *szerkezeti információt* nyerjünk vele az atommagra vonatkozóan.

Meg kell jegyezni, hogy a  $^{212m}\text{Po}$  izomérre vonatkozó számolást mintegy tíz éve már elvégezték [21] szintén a Mang-elmélet keretei között. Céлом ezen számolás reprodukálásával az volt, hogy kipróbáljam saját építésű programomat ismert esetre. Ugyanezen cél vezérel a következő pontban, ahol programomat a  $^{211}\text{Po}$  atommag finomszerkezetének leírására alkalmazom.

#### 4.1.2. A $^{211}\text{Po}$ atommag $\alpha$ -bomlásának finomszerkezete

A 2. ábrán (5. oldal) a  $^{211}\text{Po}$  atommag alapállapotának bomlási sémáját láthatjuk. A  $^{211}\text{Po}$  atommag alapállapota  $9/2^+$  spinparitással rendelkezik, amelyet a  $2g9/2$  héjon levő utolsó (pár nélküli) neutron hoz létre. A 0,52 másodperces felezési idejű mag  $\alpha$ -sugárzásában három komponenst észleltek [2]: egy 7,44 MeV energiájút, 99%-os intenzitással, egy 6,90 MeV energiájút 0,5%-os intenzitással és egy

IVa. TÁBLÁZAT

	$\frac{\Gamma(6,90)}{\Gamma(7,44)}$	$\frac{\Gamma(6,57)}{\Gamma(7,44)}$	$\frac{L=3}{L=5}$	$\frac{L=3}{L=7}$
jelen számolás	$0,69 \cdot 10^{-2}$	$0,43 \cdot 10^{-2}$	0,64	0,53
[15]	$1,1 \cdot 10^{-2}$	$0,45 \cdot 10^{-2}$	0,97	0,73
kísérlet	$0,53 \cdot 10^{-2}$	$0,50 \cdot 10^{-2}$	0,96	0,56

IVb. TÁBLÁZAT

Részletes számítási eredmény a  $\text{Po}^{211} \rightarrow \text{Pb}^{207} + \alpha$  bomlásához. A bomlás finomszerkezetét és a 6,90 MeV-os  $\alpha$ -csoporton belüli impulzusmomentum szerinti eloszlást a számítás jól tükrözi (l. IVa. táblázat).  $r=9,0$  fm.

$E_\alpha$	Konfiguráció	$L$	$G'(r)$	$r/(1-rq)$	$G(r)$	$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{(1-rq)^2}{2q}$	$\frac{\delta^2}{\text{[MeV]}}$	$T$	$\Gamma_L$ [MeV]	$\Gamma$ [MeV]
7,44	$[(\{h9/2\}_8^2 g9/2\}^3 \cdot p1/2)_L^4]$	5	-0,0749	-0,534	0,0650	378	4,17	$1,08 \cdot 10^{-18}$	$4,5 \cdot 10^{-18}$	$4,5 \cdot 10^{-18}$
6,90	$[(\{h9/2\}_8^2 g9/2\}^3 \cdot f5/2)_L^4]$	3	-0,0116	-0,543	0,0106	371	0,1059	$6,66 \cdot 10^{-20}$	$7,0 \cdot 10^{-21}$	
		5	-0,0326	-0,527	0,0281	383	0,785	$1,42 \cdot 10^{-20}$	$1,1 \cdot 10^{-20}$	
		7	-0,113	-0,506	0,0899	400	8,653	$1,55 \cdot 10^{-21}$	$1,3 \cdot 10^{-20}$	$3,2 \cdot 10^{-20}$
6,57	$[(\{h9/2\}_8^2 g9/2\}^3 \cdot p3/2)_L^4]$	3	-0,0693	-0,538	0,0640	375	3,847	$4,07 \cdot 10^{-21}$	$1,6 \cdot 10^{-20}$	
		5	-0,0749	-0,523	0,0650	387	4,20	$8,57 \cdot 10^{-22}$	$3,6 \cdot 10^{-21}$	$1,9 \cdot 10^{-20}$



6,57 MeV energiáját, ugyancsak 0,5%-os relatív gyakorisággal. Ezek a sugárzások rendre megfelelnek a  $^{211}\text{Po}$  alapállapotából az  $^{207}\text{Pb}$   $1/2^-$ -os alap- és  $5/2^-$ -os, illetve  $3/2^-$ -os gerjesztett állapotába való átmenetnek. Az  $^{207}\text{Pb}$  állapotainak spinjét az utolsó neutron szolgáltatja, amely, az előbbi sorrendben, rendre a  $3p1/2$ ,  $2f5/2$  és  $3p3/2$  kvantumszámokkal jellemzett egyrészecske pályákat tölti be. Ennek az utolsó neutronnak a párja kapcsolódik össze a  $^{211}\text{Po}$  kétszeresen zárt  $^{208}\text{Pb}$  törzsén kívüli három nukleonnal, amelyek konfigurációja

$$\{(1h\ 9/2)_{j_p=0}^2\ 2g\ 9/2\}_{9/2}^3 \quad (4.1.7)$$

Ehhez a konfigurációhoz kapcsolódik tehát a negyedik nukleon (neutron) a  $p$  vagy az  $f$ -héjról. Mivel ez a bomlás reguláris  $\alpha$ -bomlás, a kezdeti és végállapot paritásának meg kell egyeznie. Így az  $\alpha$ -részecske  $L$  pályaimpulzusmomentuma csak páratlan értéket vehet fel. A  $3p1/2$ -es neutron kapcsolódásakor a pályamomentum egyedüli lehetséges értéke  $L=5$ . A  $2f5/2$  héjon levő neutron csatolódásakor  $L=3, 5, 7$  lehet, míg a  $3p3/2$  héjról való csatolódás esetén az  $\alpha$ -részecske pályamomentuma  $L=3, 5$  értéket vehet fel.

Mindez világosan kitűnik a IVb. táblázatból, ahol feltüntettem a háromféle energiának megfelelő csatolási rendet, ezeken belül az  $\alpha$ -részecske lehetséges  $L$  pályamomentumát, a részletes számítási eredményekkel együtt.

A IVa. táblázat tartalmazza a kapott eredményekből kiszámolható intenzitás-viszonyokat, amelyek a  $^{211}\text{Po}$   $\alpha$ -bomlásának finomszerkezetére adnak felvilágosítást. A IVa. táblázatban feltüntettem az  $E=6,90$  MeV energiájú komponensben levő három impulzusmomentum állapotú ( $L=3, 5, 7$ )  $\alpha$ -részecskék egymáshoz viszonyított gyakoriságát is. Az eredményeket itt is összevettem egy korábbi számolással [15], valamint a kísérlettel. [15]-től való eltérés oka az, hogy a (3.3.78) alatti Mang-féle  $T$  penetrációs faktor számolásakor a Coulomb potenciál mellett a nukleáris kölcsönhatás [12]-ben megadott optikai potenciálját is figyelembe vettem.

#### 4.2. Az $^{16}\text{O}$ atommag $2^+$ spinparitású gerjesztett állapotainak redukált szélessége

A továbbiakban elhagyjuk a nehéz magok tartományát, amellyel csak azért foglalkoztam, hogy kipróbáljam a Mang-elmélet alapján írt számítógépprogramot. A dolgot háttralevő részében az  $^{16}\text{O}$  atommaggal foglalkozunk.

Az  $^{16}\text{O}$  atommag alapállapotában stabil. Azonban, ha 7,1615 MeV energiánál nagyobb energiát közlünk vele, akkor a keletkezett gerjesztett állapot elbomolhat  $\alpha$ -részecske kibocsátásával. Ezt a jelenséget *indukált  $\alpha$ -bomlás*nak nevezzük.

Az  $^{16}\text{O}$  atommag gerjesztett állapotai közül csak a  $2^+$  spinparitású nívóknál bekövetkező  $\alpha$ -bomlásokkal fogok foglalkozni, mivel ezeknek a későbbiekben (ld. 5. fejezet) nagy szerepük lesz. A következő pontban meghatározom e nívók redukált szélességeit.

##### 4.2.1. Kísérleti redukált szélességek meghatározása az $R$ -mátrix elmélet alapján

Amint a 3.3.1. pont végén kihangsúlyoztam, a (3.3.48) alatti összefüggés módot nyújt a redukált szélességnek kísérletekből való extrahálására. Ismernünk kell a kérdéses nívó (esetünkben valamelyik  $2^+$  spinparitású  $^{16}\text{O}$  nívó)  $\alpha$ -bomlással szem-

ben mutatott  $\Gamma_r$  szélességét, valamint az  $U_{\text{opt}}$   $\alpha$ -leánymag potenciált. Ez utóbbi ismeretében meg kell oldanunk a (3.3.46)-os Schrödinger egyenletet, amelyet most egyszerűbb, a megoldás szempontjából praktikusabb alakban írok fel:

$$u''(r) = A(r)u(r), \quad (4.2.1)$$

ahol a két vessző az  $r$  relatív távolság szerinti második deriváltat jelenti és

$$A(r) = \frac{L(L+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E), \quad (4.2.2)$$

ahol

$$V = U_{\text{opt}} + \begin{cases} \frac{2Ze^2}{2R_c} \left[ 3 - \left( \frac{r}{R_c} \right)^2 \right], & \text{ha } r \leq R_c \\ \frac{2Ze^2}{r}, & \text{ha } r \geq R_c. \end{cases} \quad (4.2.3)$$

Itt  $R_c$  az atommag töltéssugarát jelöli,  $Z$  a leánymag rendszáma,  $e$  az elemi töltés,  $L$  az  $\alpha$ -részecske leánymaghoz viszonyított impulzusmomentumának kvantumszáma.

A (4.2.1) Schrödinger egyenletet úgy kell megoldani, hogy megoldásai a végtelemben Coulomb hullámfüggvények legyenek. Megoldásaik a modifikált Coulomb hullámfüggvények. Ezekből képezhető az összes mennyiség, ami a (3.3.48)-as képletben szerepel.  $\Gamma_r$  ismeretében  $\gamma_\lambda^2$  redukált szélesség kiszámítható.

A (4.2.3) potenciálban szereplő  $U_{\text{opt}}$   $\alpha$ - $^{12}\text{C}$  potenciált az irodalomból [22] vettem.  $U_{\text{opt}}$  Saxon—Woods formában van megadva:

$$U_{\text{opt}} = \frac{-U_0}{1 + e^{r-4,3/0,5}}, \quad (4.2.4)$$

ahol  $U_0 = 145$  MeV.

(4.2.1)-et Fox—Goodwin módszerrel [23] oldottam meg. A programot az alábbi módokon teszteltem:

1.  $U_0=0$ ,  $Z=0$ ,  $l=0$  esetén visszakaptam a sinus, ill. cosinus megoldást.
2.  $U_0=0$ ,  $Z=0$  esetén szferikus Bessel megoldást kaptam.
3.  $U_0=0$  esetén megkaptam a Coulomb hullámfüggvényeket.

Ily módon meggyőződve a program helyességéről, a (4.2.4) nukleáris kölcsönhatás bekapcsolásával megkaptam a modifikált Coulomb hullámfüggvényeket. Ezekből képeztem a  $\bar{P}$ ,  $\bar{S}$ ,  $\bar{\Phi}$  mennyiségeket és energia szerinti deriváltjaikat, valamint a  $\bar{B}$  logaritmikussá deriváltat. Ezek, illetve a kísérletből vett  $\Gamma_r$  szélességértékek felhasználásával kiszámítottam az egyes  $2^+$  spinparitású nívókhoz tartozó redukált szélességeket a (3.3.48) összefüggés alkalmazásával. Az eredményt az V. táblázat tartalmazza, ahol feltüntettem rendre a nívó gerjesztési energiáját ( $E_{\text{gerj}}$ ) a bomláskor felszabaduló  $\alpha$ -részecske kinetikus energiáját ( $E_\alpha$ ), a nívó ( $\alpha$ -bomlással szemben mutatott) szélességét ( $\Gamma_r$ ), valamint a kapott redukált szélesség értékeit ( $\gamma_{\text{kis}}^2$ ).



Az első  $2^+$ -os nívó alatta van a 7,1615 MeV küszöbértéknek, így ez a nívó nem tud  $\alpha$ -sugárzással bomlani. Ezért természetesen kísérleti redukált szélességet sem lehet kapni erre a nívóra. Azonban (3.3.9) szerint a redukált szélesség amplitúdó s így ennek négyzete, a redukált szélesség nem feltétlenül zérus a 6,92-es nívóra. Az 5. fejezetben látjuk majd, hogy a paritás-sértő  $\alpha$ -bomlás esetén ennek a redukált szélesség amplitúdónak nagy fontossága van és — mint a bevezetőben már említettem — a dolgozat fő célja az, hogy erre megbízható számértéket szolgáltatasson.

A többi  $2^+$ -os nívó esetében a  $\gamma_{\text{kis}}$  kísérleti redukált szélességek természetesen függenek az  $r_c$  csatornasugártól. (Csak a teljes szélesség ( $\Gamma_r$ ) független a csatornasugártól.) Praktikus okokból az önkényesen választható csatornasugárra azt az értéket vettem, amelynél az elméleti és kísérleti redukált szélesség értékek mind a három küszöb feletti állapotra megegyeztek (l. 4.2.3. pont).

A 6,92 MeV  $2^+$ -os nívó redukált szélességének meghatározására csupán az elmélet képes. Ezért szükségünk van olyan hullámfüggvényekre, amelyek az  $^{16}\text{O}$  atommag gerjesztett állapotait írják le. Ilyen hullámfüggvények a Zuker hullámfüggvények, amelyek mibenlétét a következő pontban fogom ismertetni.

#### 4.2.2. Zuker hullámfüggvények használata

1968-ban A. P. Zuker, B. Buck és J. B. McGregory egzakt héjmodell számolást végzett az  $^{16}\text{O}$  atommagra [24, 25]. Az azóta eltelt hat év alatt újabb, versenyképes számolást nem végeztek sehol a világon és a legújabb kísérletek is a Zuker héjmodell számolásból nyert hullámfüggvények javára döntenek [26]. Mondhatjuk tehát, hogy jelenleg az  $^{16}\text{O}$  atommag állapotainak legjobb leírását a Zuker számolás szolgáltatja.

A Zuker számolás az  $^{16}\text{O}$  atommag egy gerjesztett állapotának (pl. a 6,92 MeV energiájú első  $2^+$  állapotnak) a hullámfüggvényét a

$$\Psi = \sum_i c_i \psi_i \quad (4.2.5)$$

formában adja meg, ahol a  $c_i$  együtthatókat diagonalizálással határozták meg a  $\psi_i$  bázisfüggvények terében. A  $\psi_i$  bázisfüggvény az inertnek tekintett  $^{12}\text{C}$  törzsön kívül elhelyezkedő 4 nukleon hullámfüggvénye. Az  $i$  index jellemzi a 4 nukleonnak az  $1p_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$  és  $1d_{5/2}$  alhéjakon való eloszlását és egymáshoz való csatolódását. Az általános csatolási séma a következő:

$$[(1d\ 5/2)_{J_1 T_1}^{n_1} (2s\ 1/2)_{J_2 T_2}^{n_2} J_{12}^{n_1+n_2} (1p\ 1/2)_{J_3 T_3}^{n_3}]_{JT}^J, \quad (4.2.6)$$

ahol  $n_1$ ,  $n_2$  és  $n_3$  az alhéjakon elhelyezkedő nukleonok számát jelöli;  $J_1$ ,  $J_2$  és  $J_3$ , illetve  $T_1$ ,  $T_2$  és  $T_3$  az alhéjak nukleonjainak összipulzusmomentuma, illetve összizospinje;  $J_{12}$  és  $T_{12}$  jelenti az első két alhéj csatolódásának eredményét, míg  $J$  és  $T$  az eredő impulzusmomentumot, illetve izospint.



VI. TÁBLÁZAT

Spinparitás	Zuker	Kísérlet
$2_1^+$	7,39	6,92
$2_2^+$	10,27	9,85
$2_3^+$	11,77	11,52
$2_4^+$	12,70	13,02

Számunkra csak az  $^{16}\text{O}$  első négy  $2^+$ -os nívója elérhető, mivel Zuker számolások csak eddig vannak. A kísérletek tanúsága szerint [2] ezen nívók mindegyike zérus izospinű. Tehát esetünkben  $J=2$ ,  $T=0$ . Érdekesség kedvéért összevetjük a Zuker számolás összenérgiáját a kísérleti értékkel az  $^{16}\text{O}$  első négy  $2^+$  spinparitású gerjesztett állapotára (VI. táblázat).

Az egyezés jónak mondható.

A négy  $2^+$  spinparitású gerjesztett állapotra vonatkozó  $c$  kifejtési együtthatók és az  $i$  indexeknek megfelelő csatolási rendek a VII. táblázatban találhatók.

A Zuker hémmodell számolásra további részleteket [27] és [25] tartalmaz.

VII. TÁBLÁZAT

Zuker hullámfüggvények

$i$	$n_1 n_2 n_3$	$2J_1 2J_2 2J_3$	$2T_1 2T_2 2T_3$	$2J_{12} 2T_{12}$	$c_i(2_1^+)$	$c_i(2_2^+)$	$c_i(2_3^+)$	$c_i(2_4^+)$
1	0 2 2	0 2 2	0 0 0	2 0	-0,074 7383	0,651 0675	-0,492 7526	0,181 0245
2	1 1 2	5 1 0	1 1 2	4 2	0,358 6747	0,129 7866	-0,011 7517	-0,540 4249
3	1 1 2	5 1 2	1 1 0	4 0	-0,072 4262	-0,047 7196	-0,019 7859	0,278 5048
4	1 1 2	5 1 2	1 1 0	6 0	0,092 6152	-0,042 4911	-0,304 7288	-0,527 9201
5	1 3 0	5 1 0	1 1 0	4 0	-0,421 6644	-0,230 2383	-0,320 8384	-0,193 8059
6	2 0 2	2 0 2	0 0 0	2 0	-0,085 9182	0,490 1532	-0,218 8582	0,063 6109
7	2 0 2	4 0 0	2 0 2	4 2	0,341 0452	-0,374 8960	-0,554 3295	0,248 4099
8	2 0 2	6 0 2	0 0 0	6 0	0,078 8757	-0,096 3756	-0,310 8333	-0,250 6346
9	2 2 0	2 2 0	0 0 0	4 0	-0,082 6872	0,077 7932	0,016 6208	-0,087 0069
10	2 2 0	4 0 0	2 2 0	4 0	-0,238 6056	-0,014 4065	-0,012 5945	-0,156 1882
11	2 2 0	6 2 0	0 0 0	4 0	0,228 6175	0,084 8268	0,109 0394	0,154 7051
12	3 1 0	3 1 0	1 1 0	4 0	-0,211 3958	-0,055 1500	-0,055 0478	-0,074 5142
13	3 1 0	5 1 0	1 1 0	4 0	0,473 6934	0,191 5933	0,161 7788	-0,084 8582
14	3 1 0	5 1 0	1 1 0	4 0	0,091 9938	0,077 4161	0,070 6051	-0,058 1596
15	4 0 0	4 0 0	0 0 0	4 0	0,361 8321	-0,167 8777	-0,226 3956	0,263 4441
16	4 0 0	4 0 0	0 0 0	4 0	0,001 2655	0,093 3320	0,032 7827	-0,043 0199
17	4 0 0	4 0 0	0 0 0	4 0	0,140 4675	0,126 4807	0,101 1383	-0,066 1321

#### 4.2.3. Elméleti redukált szélességek illesztése a kísérleti értékekhez

A Zuker hullámfüggvények nem használhatók fel közvetlenül a (3.3.76) redukált szélesség amplitúdók kiszámolására. Ugyanis  $G(r)$  (3.3.89)-es és (3.3.93)-mal módosított kifejezése proton-neutron formalizmusban lett meghatározva, a Zuker hullámfüggvény pedig izospin formalizmusban van megadva. Ezért a VII. táblázatban megadott összes konfigurációra (csatolási rendre) transzformációt kellett alkalmazni, hogy az izospin formalizmusban felírt Zuker hullámfüggvényeket alkalmassá tegyük a  $p-n$  formalizmusban megadott (3.3.89)-es kifejezés számolására. Ezt a transzformációt mind a 17 konfigurációra elvégeztük [28], majd beépítettem a Mang elmélet alapján működő computer programomba.

Ily módon lehetőség nyílt az  $^{16}\text{O}$  atommag első négy  $2^+$  spinparitású gerjesztett állapotához tartozó redukált szélesség elméleti meghatározására a Zuker magmodell és a Mang  $\alpha$ -bomlás modell keretein belül.  $r_c=4,73$  fm esetén jó egyezést sikerült

elérni a 4.2.1. pontban meghatározott kísérleti redukált szélesség  $\gamma_{\text{kis}}^2$  értékeivel, mind a három küszöb feletti gerjesztett állapotra. Az eredményeket a VIII. táblázat tartalmazza.

Az elméleti redukált szélesség  $\gamma_{\text{elm}}^2$  számolása egyúttal a redukált szélesség amplitúdókat is megadja (l. utolsó előtti oszlop).

A kísérleti és elméleti redukált szélességek közötti egyezést a csatornasugár megfelelő választásával (ld. utolsó oszlop) sikerült elérni. Az egyezést szolgáltató csatornasugarakban mutatkozó *szabályosság* alapján feltételezem, hogy a küszöb

VIII. TÁBLÁZAT

$J^\pi$	$E_{\text{gerj}}$ [MeV]	$\gamma_{\text{kis}}^2$ [MeV]	$\gamma_{\text{elm}}^2$ [MeV]	$ \gamma_{\text{kis}} $ [MeV <sup>1/2</sup> ]	$\gamma_{\text{elm}}$ [MeV <sup>1/2</sup> ]	$r_c$ [fm]
$2_4^+$	13,02	$3,40 \cdot 10^{-3}$	$3,48 \cdot 10^{-3}$	$5,82 \cdot 10^{-2}$	$-5,90 \cdot 10^{-2}$	4,73
$2_3^+$	11,52	$8,85 \cdot 10^{-4}$	$1,03 \cdot 10^{-3}$	$2,97 \cdot 10^{-2}$	$-3,21 \cdot 10^{-2}$	4,73
$2_2^+$	9,58	$2,25 \cdot 10^{-3}$	$2,15 \cdot 10^{-3}$	$4,74 \cdot 10^{-2}$	$-4,64 \cdot 10^{-2}$	4,73
$2_1^+$	6,92	—	$1,15 \cdot 10^{-2}$	—	$-1,07 \cdot 10^{-1}$	4,73

alatti 6,92 MeV-os nivóra elvégzett redukált szélesség amplitúdó számítás akkor adja a valósághoz legközelebb álló értéket, ha az  $r_c$  csatornasugarat a három kísérleti nivóra megállapított módon választom.

Ezen feltevést elfogadva, kiszámítottam a 6,92 MeV-os  $2^+$  spinparitású küszöb alatti nivó redukált szélesség amplitúdóját is (l. VIII. táblázat, utolsó sor).

Érdeemes külön felhívni a figyelmet arra, hogy a VIII. táblázat a redukált szélesség amplitúdók *előjelét* is megadja.

A VIII. táblázatban felsorolt redukált szélesség amplitúdóknak fontos szerep jut az  $^{16}\text{O}$  atommag 8,87 MeV-os  $2^-$  állapotának paritássértő  $\alpha$ -bomlásában. A dolgozat hátralevő részében erről lesz szó (bővebbet l. [27]).

## 5. AZ $^{16}\text{O}$ IRREGULÁRIS (PARITÁSSÉRTŐ) $\alpha$ -BOMLÁSA

Jelöljük a szülőmag paritását  $\Pi_p$ -vel, a leánymag paritását  $\Pi_d$ -vel, az  $\alpha$ -részecske relatív pályamenti impulzusmomentumát  $L$ -lel. *Irreguláris  $\alpha$ -bomlásról* akkor beszélünk, ha

$$\Pi_p \neq (-1)^L \Pi_d. \quad (5.1)$$

Wüffler [29] és munkatársai észleltek ilyen típusú  $\alpha$ -bomlást. Az effektus rendkívül gyenge volta miatt a kísérleti körülményeket úgy kellett megválasztani, nehogy a mindig jelenlevő reguláris  $\alpha$ -bomlásból származó háttér az észlelést lehetetlenné tegye. Ilyen alkalom kínálkozott az  $^{16}\text{O}$  atommag 8,87 MeV,  $2^-$  spinparitású gerjesz-



tett állapotából történő  $\alpha$ -bomlás esetén. Mint a felrajzolt nívósémából kiderül (9. ábra), ez a nívó a  $^{16}\text{N}$  10,4 MeV,  $2^-$  spinparitású,  $\beta$ -aktív gerjesztett állapotából tölthető fel 1,1 %-ban. Ez az állapot legerejesztődik alapállapotba  $\gamma$ -sugárzással (az ábrán hullámos vonal). Ha vannak olyan, nukleonok között ható erők, amelyek sértik a paritást, akkor bizonyos valószínűséggel bekövetkezik az ábrán PV-vel (parity-violation) jelölt irreguláris  $\alpha$ -bomlás is. A reguláris  $\alpha$ -bomlásból (PC=parity-conservation) származó háttér egyedül a 9,61 MeV  $1^-$  spinparitású szinttől ered és várhatóan nem nyomja el az effektust, mivel csak egyezred %-ban népesül be.

Wäffler összesen 3000 órán át mért. Ebből 1000 órát különböző segédmérésekre, 400 órát pedig a háttér mérésére fordított. A megmaradó 1600 óra alatt  $8800 \pm 2100$  db olyan  $\alpha$ -részecskét detektált, amely a paritás megmaradása által tiltott, (5.1) típusú  $\alpha$ -bomlásból eredt. Ebből az irreguláris  $\alpha$ -bomlás szélességére a

$$\Gamma_{\alpha}^{\text{PV}}(^{16}\text{O}, 8,87, 2^-) = (1,03 \pm 0,28) \cdot 10^{-10} \text{ eV} \quad (5.2)$$

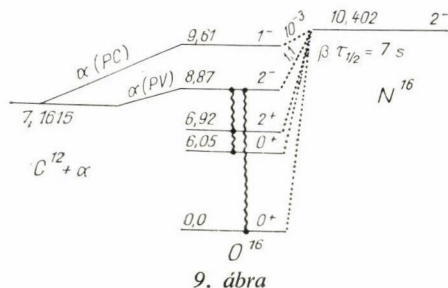
értéket kapta.

Paritássértő nukleon-nukleon kölcsönhatás létezésének nem ez az egyedüli bizonyítéka. A hatvanas évek elejétől kezdve, főként elektromágneses magátmenetek mérésével, kutattak paritássértő állapotváltozás után.

Az atommagfizikában szóba jövő három kölcsönhatástípus (gyenge, elektromágneses, erős) közül a gyengekölcsönhatás az, ami ellentétes paritású állapotok között is közvetít. A legutóbbi időkben bizonyos kísérletek eredményeit [30] csak úgy lehetett megmagyarázni, ha feltették, hogy az elektromágneses kölcsönhatásnak van paritássértő része is [31]. Másrészt, néhány éve intenzív kutatás folyik a paritássértő  $\alpha$ -bomlás elméleti értelmezése terén [32] és az ott felsorolt irodalom). Az eddigi számítások közös jellemzője az, hogy az  $\alpha$ -bomlás elméletét csak nagyon közelítő módon vették figyelembe, és csupán a gyengekölcsönhatás elméletek által szolgáltatott különböző paritássértő nukleon-nukleon  $n-n$  potenciálok hatását vizsgálták. A számítások általában favorizáltak egy-egy gyengekölcsönhatási elméletet; azt ugyanis, amelynek megfelelő paritássértő nukleon-nukleon potenciállal kapott számítási eredmény a legjobban megközelítette a kísérleti (5.2) értéket. Ha azonban, a legutóbbi vizsgálatok eredményeképpen, a gyengekölcsönhatásból származó paritássértő  $n-n$  kölcsönhatáshoz hozzávesszük az elektromágneses kölcsönhatás paritássértő részéből eredő  $n-n$  kölcsönhatást is, akkor az eddigi eredmények lényegesen módosulnak [31].

Ezt a dilemmát fel lehetne oldani akkor, ha pl. kiderülne, hogy az  $\alpha$ -bomlás eddigi nagyon közelítő jellegű figyelembevétele nem megengedhető az  $^{16}\text{O}$  atommag irreguláris  $\alpha$ -bomlásának számolásához.

Ezért a következőkben az irreguláris  $\alpha$ -bomlás elméletével foglalkozunk. A perturbációs számítás segítségével az irreguláris  $\alpha$ -bomlás számolása visszavezethető reguláris bomlások számolására. Ezért elsőként a paritássértő potenciál  $V^{\text{PV}}$  perturbációs számítással figyelembe vehető hatásáról lesz szó.



9. ábra



### 5.1. Az irreguláris $\alpha$ -bomlás elmélete

#### 5.1.1. Perturbációszámítás

Tekintsünk egy nukleonokból álló rendszert, amelyben a nukleonok között paritássértő erők is hatnak. Ezeket az erőket  $V^{\text{PV}}$  potenciállal jellemezzük. A paritást őrző kölcsönhatást  $H_0$ -lal jelöljük. Tegyük fel, hogy a rendszert leíró  $H$  Hamiltoni a kétféle kölcsönhatás egyszerű *összeadásával* előállítható, azaz

$$H = H_0 + V^{\text{PV}}. \quad (5.1.1)$$

Itt tehát  $H_0$  a szokásos magfizikai Hamilton operátor, amelyet a megszokott magfizikai számolásokban használunk.  $H_0$ -ról feltesszük egyelőre, hogy sajátfüggvényeit és sajátértékeit ismerjük, tehát megoldottuk a

$$H_0 |J(\pi); s\rangle = E_s |J(\pi); s\rangle \quad (5.1.2)$$

problémát. Itt  $J(\pi)$  az állapot spinparitását,  $| \rangle$  az állapotot jelöli,  $s$  pedig az állapotokat számozza.

$V^{\text{PV}}$ -ről feltesszük, hogy kétnukleon paritássértő potenciálok összegeként állítható elő, azaz

$$V^{\text{PV}} = \sum_{ij} v_{ij}^{\text{PV}}. \quad (5.1.3)$$

A kétnukleon paritássértő potenciálok a gyengekölcsönhatás különböző elméleteiből vehetők át [34].

Az egész rendszerre vonatkozó Schrödinger egyenlet a következő:

$$H |J, i\rangle = E_i |J, i\rangle \quad (5.1.4)$$

Mivel a gyengekölcsönhatás erőssége kicsiny az erőskölcsönhatáshoz viszonyítva (azaz

$$\frac{G}{g} \approx 10^{-6}, \quad (5.1.5)$$

ahol  $G$  a gyengekölcsönhatás,  $g$  pedig az erős kölcsönhatás csatolási állandója), elegendő a perturbációszámítás első rendjéig elmenni, s így a rendszer teljes hullámfüggvénye a következőképpen írható

$$|J, i\rangle = |J(\pi), i\rangle + \sum_s \int F_s |J(-\pi), s\rangle, \quad (5.1.6)$$

ahol az  $F$  keveredési amplitúdók az

$$F_s = \frac{\langle J(-\pi), s | V^{\text{PV}} | J(\pi), i \rangle}{E_i^{(\pi)} - E_s^{(-\pi)}} \quad (5.1.7)$$

képletből határozhatók meg.

A (5.1.6)-ban látható integrál jel azt jelenti, hogy az összegzés  $H_0$  folytonos állapotaira is kiterjesztendő elvben. A gyakorlatban azonban, s ezt (5.1.7) energia nevezője indokolja, elegendő csak a szomszédos nivókra összegezni (5.1.6)-ban.

### 5.1.2. Visszavezetés reguláris $\alpha$ -bomlásra

Feladatunk az, hogy meghatározzuk az  $^{16}\text{O}$  atommag 8,87 MeV  $2^-$  spinparitású állapotából történő irreguláris  $\alpha$ -bomlás szélességét. Alkalmazzuk a megismert mikroszkopikus  $\alpha$ -bomlás elméleteket a problémára!

Thomas elmélete a bomlás szélességére (l. (3.3.48)-as egyenlet) a

$$\Gamma^{\text{PV}} = \frac{2}{\frac{\bar{P}/\gamma^2 + \bar{P}\dot{\bar{S}} - \dot{\bar{P}}(\bar{S} - \bar{B})}{\bar{P}^2 + (\bar{S} - \bar{B})^2} - \dot{\bar{\Phi}}} \quad (5.1.8)$$

képletet szolgáltatja.

Mang elmélete a bomlás szélességére (ld. (3.3.77)-es egyenlet) a

$$\Gamma^{\text{PV}} = T \cdot \delta^2(\gamma) \quad (5.1.9)$$

képletet adja.

A fenti képletekben a magszerkezet hatása a  $\gamma$  redukált szélesség amplitúdón keresztül érvényesül. Ezért figyelmünket elsősorban erre a mennyiségre fordítjuk.

Számítsuk ki a  $\gamma$  amplitúdót az  $^{16}\text{O}$  8,87 MeV  $2^-$  spinparitású állapotából történő irreguláris  $\alpha$ -bomlásra vonatkozóan! Ennek érdekében először is felidézzük  $\gamma$  definícióját (l. (3.3.9) és (3.3.76)-os egyenletet). Ez, egy állandó szorzótényezőtől eltekintve a

$$\gamma \sim \int \Phi_d^*(\xi_d) \Phi_\alpha^*(\xi_\alpha) Y_{LM}^*(\theta, \varphi) \Phi_p(\xi_p) dS \equiv \\ \equiv \langle \{({}^{12}\text{C}, 0, 0^{+-}) + (\alpha, 0, 0^{+-})\}_{L=2} | ({}^{16}\text{O}, 8,87, 2^{-+}) \rangle_{r=r_c} \quad (5.1.10)$$

átfedési integrállal egyenlő, ahol a második sorban részletesen kiírtuk az egyes állapotok jellemzőit.  $r_c$  a csatornasugár; szerepét a 4. fejezetben tárgyaltuk. A bracket-es részben levő kerek zárójelben első helyen a mag jele, második helyen állapotának energiája, harmadik helyen állapotának spinje áll. Az állapotok nem paritássaját-állapotok, mivel paritássértő erők is jelen vannak. Emlékeztetőül azonban kiírtuk a spinek felső indexébe a domináló paritást (első jel), illetve a paritássértő erők által hozzákevert ellentétes paritást (második jel). A kapcsolószerű jel indexe utal az  $\alpha$ -részecke relatív impulzusmomentumára, amely az impulzusmegmaradás miatt egyedül az  $L=2$  értéket vehet fel. Végül a bracket indexe azt jelenti, hogy az egész átfedési integrált a fragmentumok  $r_c$  relatív távolságánál kell venni.

Az (5.1.10)-ben szereplő állapotok (5.1.6) miatt a következőképpen írhatók:

$$|{}^{16}\text{O}, 8,87, 2^{-+}\rangle = |{}^{16}\text{O}, 8,87, 2^{-}\rangle + \sum_p \int F_p |{}^{16}\text{O}, E_p, 2^{+}\rangle \quad (5.1.11)$$

$$|{}^{12}\text{C}, 0, 0^{+-}\rangle = |{}^{12}\text{C}, 0, 0^{+}\rangle + \sum_d \int F_d |{}^{12}\text{C}, E_d, 0^{-}\rangle \quad (5.1.12)$$

$$|\alpha, 0, 0^{+-}\rangle = |\alpha, 0, 0\rangle + \sum_a \int F_a |\alpha, E_a, 0^{-}\rangle. \quad (5.1.13)$$

Ha ezt beírjuk (5.1.10)-be, nyolc átfedési integrált kapunk. Kapunk egy olyan tagot, amely az  $F$  keveredési amplitúdókban nulladrendű:

$$\langle \{({}^{12}\text{C}, 0, 0^{+}) + (\alpha, 0, 0^{+})\}_{L=2} | {}^{16}\text{O}, 8,87, 2^{-}\rangle. \quad (5.1.14)$$

Ez az integrál viszont egzaktul zérus, mivel az állapotok  $H_0$  sajátállapotai,  $H_0$  viszont őrzi a paritást ((5.1.2) egyenlet), s így erre a mátrixelemre teljesülnie kell a paritás-megmaradás tételének.

Hasonló ok miatt zérus a három,  $F$ -ben *másodrendű* tag. Nem zérus viszont a három,  $F$ -ben *elsőrendű* tag és az  $F$ -ben *harmadrendű* tag. Ez utóbbit azonban az előző három mellett nyugodtan elhanyagolhatjuk, lévén  $F$  igen kicsiny szám (a gyenge csatolási állandót tartalmazván).

Ezek szerint eljárva, behelyettesítés után (5.1.10)-re kapjuk

$$\begin{aligned} \gamma \sim & \sum_p \int F_p \langle \{({}^{12}\text{C}, 0, 0^+) + (\alpha, 0, 0^+)\}_{L=2} | {}^{16}\text{O}, E_p, 2^+ \rangle + \\ & + \sum_d \int F_d \langle \{({}^{12}\text{C}, E_d, 0^-) + (\alpha, 0, 0^+)\}_{L=2} | {}^{16}\text{O}, 8,87, 2^- \rangle + \\ & + \sum_a \int F_a \langle \{({}^{12}\text{C}, 0, 0^+) + (\alpha, E_a, 0^-)\}_{L=2} | {}^{16}\text{O}, 8,87, 2^- \rangle. \end{aligned} \quad (5.1.15)$$

Ez a képlet még mindig szükségtelenül bonyolult. Tekintsük ugyanis a 10. ábrát, ahol a bomlásban résztvevő magok (5.1.15)-ben szereplő nívói vannak feltüntetve. (Az  $\alpha$ -részecske spektrumát [33]-ból, a  ${}^{12}\text{C}$  és  ${}^{16}\text{O}$  spektrumát [2, 4]-ből vettem.)

Ebből látható, hogy az  $\alpha$ -részecske  $0^-$ -os nívója nagyon messze van az alapállapottól. Ugyanez a helyzet a szén esetén:  $0^+$ -os alapállapothoz keveredő  $0^-$ -os állapotai 18 MeV fölött vannak. Azt is látjuk, viszont, hogy az oxigén esetében a  $2^-$  állapot körül az előzőekhez viszonyítva közel és sűrűn helyezkednek el az  $F_p$  amplitúdók által hozzákevert  $2^+$  spinparitású szintek.

Mindezekből kiderül, hogy az  $F_p$  és  $F_d$  amplitúdók az  $F_p$  mellett elhanyagolhatók.

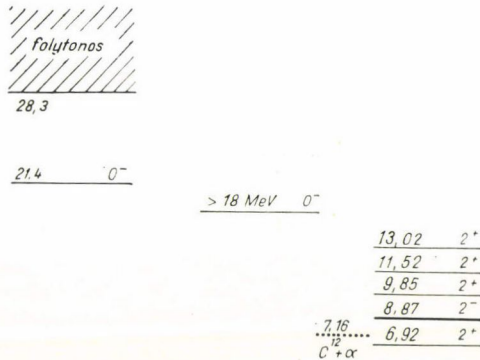
Ezért jó közelítésben

$$\gamma \sim \sum_p F_p \langle \{({}^{12}\text{C}, 0, 0^+) + (\alpha, 0, 0_+)\}_{L=2} | {}^{16}\text{O}, E_p, 2^+ \rangle \quad (5.1.16)$$

írható, ahol (5.1.7) miatt

$$F_p = \frac{\langle {}^{16}\text{O}, E_p, 2^+ | V^{PV} | {}^{16}\text{O}, 8,87, 2^- \rangle}{8,87 - E_p}. \quad (5.1.17)$$

Az  $F_p$  keveredési amplitúdók meghatározása rendkívül bonyolult feladat. Ezzel foglalkozik [27].



10. ábra



(5.1.16)-ban az  $F_p$  keveredési amplitúdók mellett a *reguláris*  $\alpha$ -bomlásnak megfelelő redukált szélesség amplitúdókat ismerhetjük fel:

$$\gamma_{\text{reg}} \sim \langle \{({}^{12}\text{C}, 0, 0^+) + (\alpha, 0, 0^+)\}_{JL=2} | {}^{16}\text{O}, E_p, 2^+ \rangle. \quad (5.1.18)$$

Ily módon látjuk, hogy az irreguláris  $\alpha$ -bomlás  $\Gamma^{\text{PV}}$  szélességének számolását\* vissza lehetett vezetni a reguláris  $\alpha$ -bomlásban szereplő redukált szélesség amplitúdók számolására.

(5.1.16)-ban összegezés van az  ${}^{16}\text{O}$  valamennyi  $2^+$  spinparitású állapotára, amelyekből elegendő a 10. ábrán látható négy nívót figyelembe venni. Ezek közül három az  $\alpha$ -bomlásra vonatkozó küszöbérték felett van, így ezekre a nívókra kísérletekből leszármaztathatjuk a redukált szélességeket (ezt tettem a 4.2.1. pontban). A redukált szélességekből — előjeltől eltekintve — megkaphatók a redukált szélesség amplitúdók (gyökvonással). Azonban a 6,92 MeV-os szint esetén a redukált szélesség amplitúdót csak számolásból ismerhetjük meg, mivel ez a nívó alatta van a küszöbnek.

A következő szakaszban ennek a nívónak a redukált szélesség amplitúdóját adom meg.

## 5.2. A 6,92 MeV energiájú nívó redukált szélesség amplitúdójának meghatározása

A címben foglalt feladatot tulajdonképpen már a 4. fejezet végén elvégeztem (VIII. táblázat). Azért foglalkozom vele mégis külön szakaszban, mert ennek a küszöb alatti szintnek a létezése indította el azokat a vizsgálatokat, amelyeket dolgozatomban kifejtettem.

Láttuk, hogy *Mang* (3.3.89)-es és (3.3.94)-gyel módosított képletével képesek vagyunk redukált szélesség amplitúdókat számolni az  ${}^{16}\text{O}$  atommag  $2^+$  spinparitású állapotaira, Zuker konfigurációkat (VII. táblázat) használva. Másrészt az  $R$ -mátrixos  $\alpha$ -bomlás elmélet (3.3.48)-as összefüggése módot nyújtott a szintek redukált szélességeinek kísérleti meghatározására. Az elméleti számolást — a csatornasugarak helyes megválasztásával — illeszteni lehetett a három kísérleti értékhez. Az egyezést adó csatornasugarakban mutatkozó *regularitás* azt sugalmazza, hogy az elméleti számítás akkor ad a 6,92 MeV-os küszöb alatti állapotra a valósághoz legközelebb eső redukált szélesség amplitúdó értéket, ha a csatornasugarat a három kísérleti nívóra megállapított módon vesszük fel.

Eszerint eljárva, a Zuker konfigurációkra alkalmazott (3.3.89—3.3.94) képlet a

$$\gamma_{\text{elm}}(6,92 \text{ MeV}, r_c = 4,73 \text{ fm}) = -0,107 [\text{MeV}^{1/2}] \quad (5.2.1)$$

értéket adta.

\* Eltekintve a bonyolult  $F_p$  keveredési amplitúdóktól, amelyeket [27] határozza meg.

## 6. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban meghatároztam az  $^{16}\text{O}$  atommag — alapállapotához viszonyítva — 6,92 MeV energiával rendelkező,  $2^+$  spinparitású állapotának *redukált szélesség amplitúdóját* (definíció (3.3.9), eredmény (5.2.1) alatt). Ezen mennyiség meghatározásához a következő úton jutottam el:

Az  $\alpha$ -bomlás küszöbenergiája felett levő nivókra a kísérleti  $\Gamma$ ,  $\alpha$ -bomlás szélességének és az  $\alpha$ -részecske — leánymag közti kölcsönhatásnak (amely szintén kísérletileg mérhető mennyiség) az ismeretében mód van a  $\gamma^2$  *redukált szélesség* meghatározására. Ezt a lehetőséget az  $\alpha$ -bomlás  $R$ -mátrix (vagy Thomas) *elmélete* [11] foglalja magában, amelyet a 3.3.1. pontban mutattam be. Az így származtatott redukált szélességet *kísérleti redukált szélesség*nek neveztem el. Kísérleti redukált szélességeket az  $^{16}\text{O}$  atommag három  $2^+$  spinparitású gerjesztett nivójára határoztam meg (4.2.1. pont, V. táblázat).

A redukált szélességek *elméleti* számolásához atommagok (szülő mag, leány mag,  $\alpha$ -részecske) teljes hullámfüggvényeinek ismeretére van szükség.

*Oscillátor héjmodell* közelítésben *Mang* volt az [15], aki meghatározta elméletileg a  $\gamma$  redukált szélesség amplitúdót. A 3.3.2. pontban *Mang* elméletét mutattam be. Röviden vázoltam, majd közöltem *Mang* számolását a  $G$  mennyiségre vonatkozóan ( $G$  és  $\gamma$  közti kapcsolat (3.3.76) alatt található). *Mang* két képletet vezetett le  $G$ -re. A képletek, amelyek lényegében átfedési integrálok, függenek attól, hogy milyen annak a négy nukleonnak ( $2p-2n$ ) a csatolódása, amelyből a bomlás során az  $\alpha$ -részecske lesz. *Mang* két képlete ((3.3.89) és ennek (3.3.94)-gyel bővített változata) a négy nukleon kétféle lehetséges csatolóadásának felel meg.

A 4.1. szakaszban a *Mang-elmélet* (3.3.77), a teljes bomlási szélességre vonatkozó végeredménye alapján végeztem számolást. A számításokat az irodalomból már ismert esetekre reprodukáltam. Célom ezzel az volt, hogy ismert esetre kipróbáljam *Mang*  $G$  amplitúdóira ((3.3.89) és (3.3.94)-gyel bővített változata) írt programot — ugyanis a (3.3.77)  $\Gamma$  szélesség számolásának lényegi részét a  $G$  amplitúdó számolása alkotja.

A  $^{212m}\text{Po}$  izomer állapotára vonatkozó számolások a (3.3.89)-et számoló programrész helyességét igazolják (4.1.1. pont, IIIa. és IIIb. táblázat).

A  $^{211}\text{Po}$  finomszerkezetére végzett számolás a (3.3.89)-cel megadott  $G$  amplitúdó (3.3.94)-gyel bővített változatát számoló programrész helyes működését igazolja (4.1.2. pont, IVa. és IVb. táblázat).

Ezek után az  $^{16}\text{O}$  atommagok  $2^+$  gerjesztett állapotait megadó Zuker-féle hullámfüggvényeket (4.2.2. pont és [24, 25]) építettem be [28] a  $G$  amplitúdót számoló programrészbe. Ezzel a programot alkalmassá tettem az  $^{16}\text{O}$   $2^+$  nivók redukált szélesség amplitúdóinak ( $\gamma_{\text{elm}}^2$ ) számolására. Ezek négyzete ( $\gamma_{\text{elm}}^2$ ) a korábban már meghatározott kísérleti redukált szélesség ( $\gamma_{\text{kis}}^2$ ) értékekkel összevethető volt. (Mind a kísérleti, mind az elméleti redukált szélesség függ az  $r_c$  csatornasugártól — csak az  $R$ -mátrix elméletbeli, (3.3.48)-cal megadott teljes szélesség független tőle [11].) Az összehasonlításból az derült ki, hogy a kísérleti és elméleti redukált szélességek egy  $r_c$  csatornasugár értékre megegyeznek (VIII. táblázat). A kísérleti mennyiségek által ily módon beállított csatornasugár-paraméter értéket elfogadva, kiszámítottam az  $^{16}\text{O}$  atommag  $\alpha$ -bomlás küszöb alatti 6,92 MeV energiájú  $2^+$  spinparitású állapotának redukált szélesség amplitúdóját ((5.2.1) egyenlet).



Megjegyzem még, hogy a kísérletekből a redukált szélesség ( $\gamma_{kis}^2$ ), s ezáltal a redukált szélesség amplitúdójának csak az abszolút értéke ( $|\gamma_{kis}|$ ) dedukálható. (Azokra a szintekre, amelyekre nem tiltott a bomlás.) Az elméleti számolás ezen mennyiségek előjelét is megadta (VIII. táblázat).

A VIII. táblázatban felsorolt redukált szélesség amplitúdók előjelhelyes értékeire az  $^{16}\text{O}$  atommag paritássértő irreguláris  $\alpha$ -bomlásának elméleti tárgyalásában van szükség. Ez a bomlás elméleti szempontból nagy jelentőséggel bír. A dolgozatban ezért az 5. fejezetet az  $^{16}\text{O}$  atommag irreguláris  $\alpha$ -bomlásának szenteltem, amely megvilágítja az eredmények alkalmazási körét.

E probléma kimerítő és jelen dolgozat eredményeit is felhasználó tárgyalását illetően a [27]-es irodalomra utalok.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Kedves kötelességemnek teszek eleget, amikor köszönetet mondok mindazoknak, akik segítségemre voltak ezen munka elkészítésében:

*Kónya Albert* akadémikusnak, intézeti vezetőmnek, amiért bátorított a dolgozat elkészítésére. Támogatása nélkül ez a disszertáció aligha született volna meg;

*Németh Juditnak*, a fizikai tudományok doktorának, amiért irányította és mindvégig figyelemmel kísérte munkámat. Értékes szakmai tanácsai sokszor segítettek a továbbhaladásban;

*Bence Gyulának*, a fizikai tudományok kandidátusának, aki a téma kidolgozásának kezdetén segített tájékozódni az  $\alpha$ -bomlás irodalmában;

*Fái György* kollégámnak, amiért a Zuker hullámfüggvényeket rendelkezésemre bocsátotta és használatukra megtanított. Folyamatos és stimuláló együttműködése nélkül ez a dolgozat nem látott volna napvilágot;

*Rajos Sándornénak*, amiért gondos munkával szép gépelést készített.

## IRODALOM

1. *K. Siegbahn* (Kiadó), Alpha-, Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1965.
2. *K. H. Hellwege* (Kiadó), Landolt—Börnstein Tables, New Series, Vol. 1, Springer-Verlag, Berlin—Göttingen—Heidelberg, 1961.
3. *H. Wäffler*, Proc. Symp. on Nucleons and Weak Interactions, Zagreb, 1971 és l. [29].
4. *T. P. Marvin és P. P. Singh*, Nucl. Phys., *A180*, 282, 1972.
5. *I. Perlman és J. O. Rasmussen*, Alpha Radioactivity, Encyclopedia of Physics, Vol. XLII, Springer-Verlag, 1957.
6. *G. Gamow*, Z. Physik, *51*, 204, 1928.
7. *E. U. Condon és R. W. Gurney*, Nature, London, *122*, 439, 1928.
8. *A. M. Lane és R. G. Thomas*, Rev. Mod. Phys., *30*, 257, 1958.
9. *R. G. Thomas*, Progr. Theoret. Phys., *12*, 253, 1954.
10. *H. J. Mang*, Phys. Rev., *119*, 1069, 1960.
11. *A. Arima és S. Yoshida*, Nucl. Phys., *A219*, 475, 1974.
12. *A. R. Barnett és J. S. Lilley*, Phys. Rev., *C9*, 2010, 1974.
13. *P. E. Hodgson*, Nuclear Reactions and Nuclear Structure, Clarendon Press, Oxford, 1971.
14. *G. Michand, L. Scherk és E. Vogt*, Phys. Rev., *C1*, 864, 1970.
15. *H. J. Mang*, Z. Physik, *148*, 582, 1957.
16. *J. L. Powell és B. Crasemann*, Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Co., London, England, 1961.
17. *R. Hofstadter*, Rev. Mod. Phys., *28*, 214, 1956.
18. *G. Racah*, Phys. Rev., *62*, 438, 1942.
19. *I. Perlman és mások*, Phys. Rev., *127*, 917, 1962.
20. *N. K. Glendenning*, Phys. Rev., *127*, 923, 1962.



21. H.-D. Zeh, Z. Physik, 175, 490, 1963.
22. E. B. Carter, G. E. Mitchell és R. H. Davis, Phys. Rev., 133, B1421, 1964.
23. Z. Kopal, Numerical Analysis, Chapman and Hall LTD London, 1955.
24. A. P. Zuker, B. Buck és J. B. McGregory, Phys. Rev. Letters, 21, 39, 1968.
25. A. P. Zuker, B. Buck és J. B. McGregory, Informal report, PD—99, BNL 14085, October, 1969.
26. N. Birk, J. S. Sokolowsky és Y. Wolfson, Nucl. Phys., A216, 217, 1973.
27. Fái György, Doktori disszertáció, ELTE, TTK, 1974.
28. Németh Judit és Fái György segítségével.
29. I. 3. és K. Neubeck, H. Schober és H. Wäffler, Phys. Rev., C10, 320, 1974.
30. V. M. Lobashov és mások, Nucl. Phys., A197, 241, 1972.
31. L. Wolfenstein, Nucl. Phys., B72, 111, 1974.
32. M. Gari, Physics Reports, 6C, 317, 1973.
33. W. E. Meyerhof és T. A. Tombrello, Nucl. Phys. A109, 1 1968
34. E. Fishbach és D. Tadić, Physics Reports, 6C, 123, 1973.



# SZEMCSEHATÁR MOZGÁS POLIKRISTÁLYOS FÉMEKBEN\*

RAJKOVITS ZSUZSA és KOVÁCS ISTVÁN  
ELTE, Általános Fizika Tanszék

## TARTALOM

1. Bevezetés
2. Szemcsehatárok polikristályokban
3. A rekrisztallizáció folyamatai
  - 3.1. Primer rekrisztallizáció
    - 3.1.1. Nukleációs modellek
    - 3.1.2. A primer szemcsék növekedése
  - 3.2. Szemcsenövekedés
    - 3.2.1. Szekunder rekrisztallizáció
    - 3.2.2. Tercier rekrisztallizáció
4. A rekrisztallizációt befolyásoló tényezők
  - 4.1. A precipitációk hatása
  - 4.2. Oldott szennyezők hatása
  - 4.3. A szemcsehatármozgás függése az orientációtól

## 1. BEVEZETÉS

Képlékenyen alakított fémekben a rácshibák miatt belső feszültségek vannak. Deformált állapotban a test szabadenergiája nagyobb, mint ugyanezen a hőmérsékleten deformáció előtt, ezért ez az állapot termodinamikailag instabil.

Nem túl magas hőmérsékleten azonban a deformált állapot mégis tartós, mert az alacsonyabb szabadenergia eléréséhez a termodinamikai hajtóerők a rácshibák mozgását akadályozó hatásokat nem tudják leküzdeni. Növekvő hőmérséklettel azonban bizonyos hibák már véges valószínűséggel megszerzik a mozgásukhoz szükséges termikus energiát; ezért megindul a hibák átrendeződése, vagy megszűnése, amely fizikai, mechanikai tulajdonságok megváltozásával jár együtt. A hőkezelés során végbemenő változásokat általában több olyan hőmérsékleti tartományba szokták sorolni, amelyekben végbemenő folyamatoknak viszonylag jól definiált aktiválási energiája van [1].

\* Érkezett 1975. márc. 6.



A legnagyobb aktiválási energiát igénylő szakasz a rekrisztallizáció, amely diszlokációk eltűnésével kapcsolatos. A tárolt energia nagy része ebben a rekrisztallizációs szakaszban szabadul fel.

A rekrisztallizáció során a deformált anyag egyes részeinek kristályorientációja többé-kevésbé átalakul. Ez az átalakulás nagyszögű szemcsehatárok vándorlásával valósul meg.

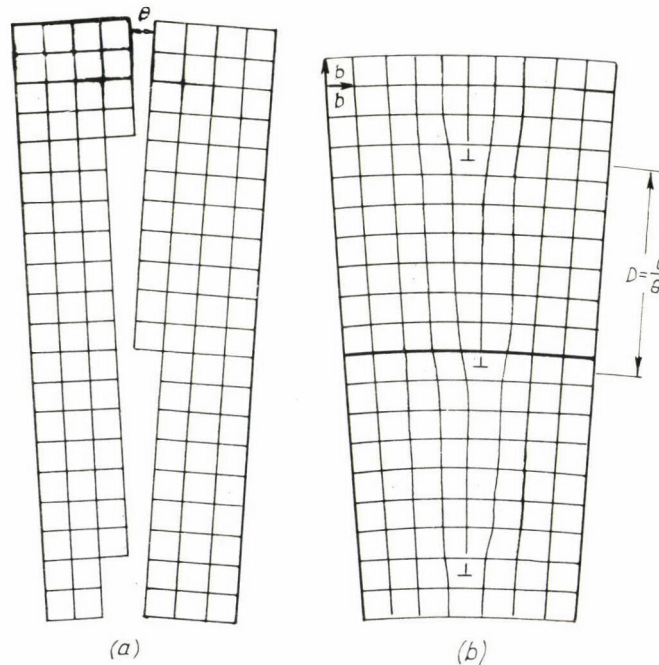
## 2. SZEMCSEHATÁROK POLIKRISTÁLYOKBAN

A polikristályokban levő krisztallitok orientációja általában különböző.

A különböző módon orientált szemcséket elválasztó határfelület a szemcsehatár. Geometriáját tekintve 5 paraméterrel jellemezhető. Ezek közül 3 paraméter az egyik szemcsének szomszédjához viszonyított kristálytani orientációját adja meg, a fennmaradó másik kettő pedig a határsík orientációjára jellemző.

A szemcsehatárokat szerkezetüket tekintve két csoportra oszthatjuk, kisszögű és nagyszögű szemcsehatárokra.

A kisszögű szemcsehatárokat diszlokációfalak alkotják. A kisszögű szemcsehatár a diszlokációk egymástól való távolságával, a Burgers vektorral és egy  $\theta$  szöggel jellemezhető (1. ábra). Azt a szimmetrikus kisszögű szemcsehatárt, amelynek egyik szemcséjét a szemcsehatárban fekvő, a diszlokációvonalakkal párhuzamos tengely körül  $\theta$  szöggel elforgatva a két szemcse illeszkedik, tilt vagy billenő szem-



1. ábra

csehatárnak nevezzük. Ha a szemcsehatár a forgástengelyre merőleges, akkor a szemcsehatárt csavardiszlokációk képezik. Ezeket kisszögű twist vagy „csavart” határnak nevezzük. A szemcsehatár szerkezetére vonatkozóan pl. a szemcsehatár energia méréséből kaphatunk információt. A kisszögű szemcsehatár energiájára a diszlokációkból álló szerkezetnek megfelelően Read—Shockley állapított meg egy összefüggést, mely az energiának a szemcsék relatív orientációjával való változását adja meg a következő alakban

$$E = E_0 \Theta [A - \ln \Theta]. \quad (1)$$

Az összefüggés a kiindulási feltevések érvényessége miatt csak kb.  $\Theta \leq 6^\circ$ -ig érvényes [2]. A szomszédos szemcsék orientációkülönbségének növekedésével a diszlokációk távolsága csökken, a szemcsehatárban az illeszkedés kisebb lesz. A kb.  $\Theta \geq 20^\circ$  szögek esetén a határ szerkezete a kisszögű szemcsehatárokhoz képest jelentősen megváltozik. A szomszédos szemcsék között jelenlevő ilyen tartományt szokták nagyszögű szemcsehatárnak nevezni.

Különböző kísérleti megfigyelések és elméleti megfontolások alapján a nagyszögű szemcsehatár szerkezetére vonatkozóan három modellt alkottak [3].

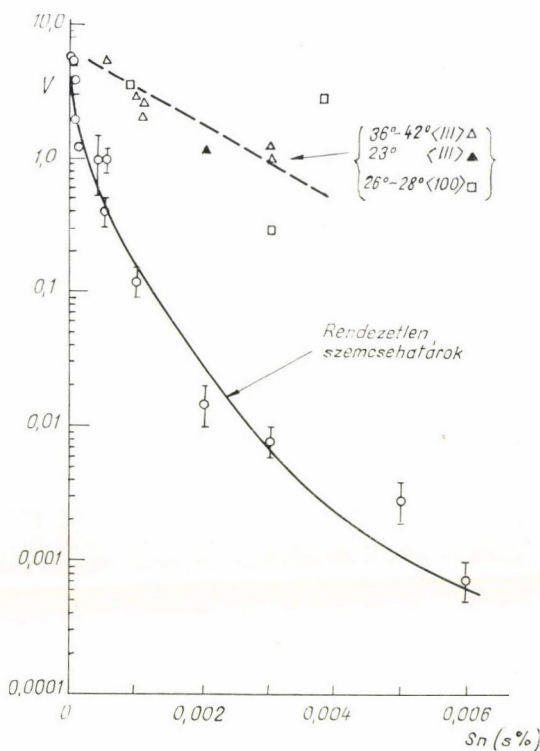
1. A „folyadékmodell” alapján a szemcsehatár a folyadék állapotához hasonló rendezetlen tartományt tartalmaz.

2. A „diszlokációmódel” szerint a nagyszögű szemcsehatár diszlokációk elrendezéséből ún. diszlokáció hálóból áll.

3. A „sziget módel” alapján a két szemcse közötti határfelületet jól vagy kevésbé jól illeszkedő atomcsoportokból állónak képzelhetjük.

Éles határt vonni ezen modellek között nem lehet. A szemcsehatár egyes tulajdonságait az egyik, másokat a másik módel alapján értelhetjük meg.

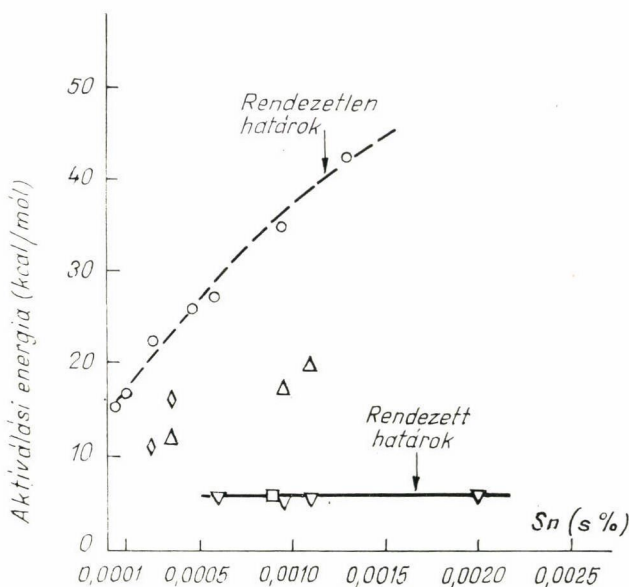
A szomszédos szemcséket elválasztó tartomány rendezettségének mértéke szerint megkülönböztetünk különböző speciális nagyszögű (pl. tilt twist, stb.) szemcsehatárokat is. Az ilyen speciális nagyszögű szemcsehatárok tulajdonságai eltérnek a rendezetlen (random) szemcsehatároktól. Ez az eltérés különösen jelentőssé válik a hőmérséklet csökkenésével. Nagyon nagy tisztaságú fémekben, (melyekben a szennyezőkoncentráció  $< 1$  ppm) nem észleltek lényeges különbséget a speciális és a rendezetlen nagyszögű szemcsehatárok viselkedésében [4]. Az eltérő vi-



2. ábra. Rendezett és rendezetlen szemcsehatár sebessége Pb—Sn ötvözetben [4]

selkedés oka ezek szerint a szennyezők szemcsehatárral való kölcsönhatásában keresendő.

Aust és Rutter mérései szerint a speciális, azaz rendezett határok sebessége szennyező jelenlétében nagyobb az ugyanolyan szennyezőtartalmú rendezetlen szemcsehatároknál (2. ábra). A szemcsehatármozgás aktiválási energiája a 3. ábrán lát-



3. ábra

ható módon változik a szennyezőtartalommal [4]. A speciális nagyszögű szemcsehatárok szerkezete, szemben a teljesen rendezetlen szemcsehatárokéval, éppen a bennük uralkodó viszonylagos rendezettség miatt szennyezők jelenlétében nem változik számottevően.

### 3. A REKRISZTALLIZÁCIÓ FOLYAMATAI

A rekrisztallizáció általában több egymástól elválasztható folyamattal megy végbe. Ezek a következők:

#### 3.1. Primer rekrisztallizáció

##### 3.1. Szemcsenövekedés

##### 3.2.1. Szekunder rekrisztallizáció (Exaggerated Grain Growth)

##### 3.2.2. Tercier rekrisztallizáció

Az alábbiakban részletesen megvizsgáljuk irodalmi adatok alapján a rekrisztallizáció egyes szakaszait.



### 3.1. Primer rekrisztallizáció

Turnbull és Burke már 1952-ben sok kísérleti tapasztalatot foglalt össze néhány törvényben [5]. Ezek szerint a primer rekrisztallizáció részletesebb kvalitatív leírása akkor vált lehetővé, amikor felismerték, hogy a folyamat két részfolyamatból tehető össze, a nukleációból, tehát növekedésre képes szemcsék keletkezéséből és a szemcsenövekedésből. A következőkben összefoglaljuk ezen részfolyamatok legfontosabb tulajdonságait.

#### 3.1.1. Nukleációs modellek

A nukleációra vonatkozóan több modell született. A modellek mindegyikében figyelembe vették a következő tapasztalati törvényeket [6]:

- a) Magok ott képződnek, ahol a lokális deformáció nagyobb.
- b) Egy kritikus feszültségen túl, növekvő feszültséggel a nukleáció sebessége nő.
- c) A nukleusok orientációja statisztikus kapcsolatban van azon szemcsék orientációjával, amelyben keletkeztek.

A klasszikus nukleációs modell szerint a nukleusok atomok véletlenszerű csoportulásaként jönnek létre. A klasszikus nukleációs modellt gőzfázisban végbemenő nukleációra dolgozták ki, szilárd közegben történő magképződésre vonatkozóan módosítani kellett. A módosítást Orowan végezte el [7]. Meghatározta azt az atomcsoport méretet, amely már nukleusnak tekinthető, azaz amely képes a további növekedésre. Ennek feltétele:

$$\Delta F 4\pi r^2 dr = \gamma 8\pi r dr, \quad (2)$$

amiből a kritikus sugár:

$$r_c = \frac{2\gamma}{\Delta F}, \quad (3)$$

ahol  $\gamma$  a deformált mátrix és a nukleus között meglevő határ fajlagos határfelületi energiája,  $\Delta F$  pedig a térfogategységben fellépő szabadenergia változás, amelyre a nukleus a deformált mátrix megszűnése következtében tesz szert. A szilárd fázisban végbemenő nukleáció sebessége Orowan szerint [7]

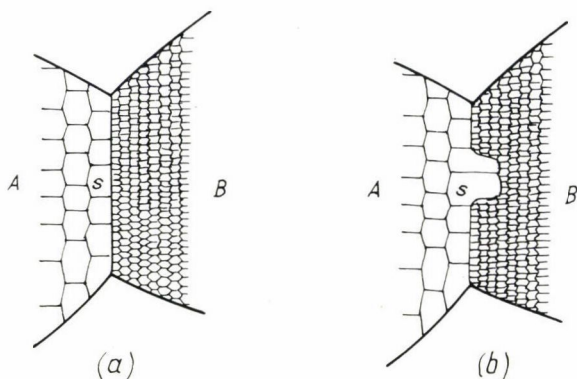
$$\frac{dN}{dt} = D \exp - \left( \frac{A}{kT} \right), \quad (4)$$

ahol  $A$  a nukleáció aktiválási energiája és  $D$  az öndiffúziós együttható. Amennyiben a  $\gamma$  helyébe a nagyszögű szemcsehatár fajlagos felületi energiáját írjuk, s  $\Delta F$ -et egy mérsékelt deformált anyag esetén kalorimetriás mérésekből adódó értéknek vesszük, akkor az aktiválási energiára  $A = 10^8$  eV, a kritikus sugárra  $r_c = 5\mu$  értéket kapjuk [7]. Egy ilyen nukleus létrehozásához a deformált mátrixban abnormálisan nagy diszlokációsűrűség szükséges, ami általában nem teljesül.

Egy másik nukleációs modellben nukleusokként a szubszemcséket tekintik. Ennek az képezi az alapját, hogy az erősen meggyöngyösült rácssíkok gyorsan poligonizálódnak, s a továbbiakban a feszültségtől mentes, átalakult területek növekednek. A növekedés a nagyobb diszlokációsűrűségű helyek felé történik. Cottrell szerint ennek az a feltétele, hogy a képződött szemcse orientációja legalább  $10-15^\circ$ -kal

eltérjen attól a szemcsétől, amelyben nő [6]. 1963-ban *Walter és Koch* kimutatott ilyenfajta nukleációt, míg *Hu* azt tapasztalta, hogy a szubszemcsék rotációval illeszkednek egymáshoz, s így képeznek nagyobb szemcsét [8].

*Beck, Sperry* (1950) deformáció indukálta határmozgás modelljének kiindulási alapja a polikristályos fémekben levő kristallitok között meglévő feszültségi energia-különbség. A szemcsehatáron képződő nukleus, a nagyobb diszlokációsűrűségű szemcse felé növekedik (4. ábra). *Aust, Dunn* (1957) igazolta ezt a feltevést. *Bailey*



4. ábra. Szemcsehatár: a) mozgás előtt, b) mozgás után

és *Hirsch* 1962-ben az ilyen típusú nukleációnak részletes energetikai analízisét is elvégezte [9]. Eszerint a szemcsehatár kihajlás növekedésének feltétele:

$$\left( \Delta E - \gamma \frac{dA}{dV} \right) > 0, \quad (5)$$

ahol  $\Delta E$  a térfogategységre eső deformációs energiakülönbség,  $\gamma$  a fajlagos felületi energia,  $\frac{dA}{dV}$  a növekvő szemcse egységnyi térfogatváltozására eső felületváltozás.

Ennek a mechanizmusnak a létezését *Tardy* (1969) a rekristallizáció közvetlen megfigyelése során észlelte és azt tapasztalta, hogy nukleus szinte kizárólag szemcsehatáron keletkezik [10].

A nukleáció sebességére vonatkozó kinetikai vizsgálatok szerint a nukleációs sebesség időbeni változása általában többféle lehet. Bizonyos esetekben kezdetben csak lassan nő, majd felgyorsul és maximumot ér el. Más esetekben a nukleációs sebessége gyakorlatilag állandó, sőt helyenként már zérus hőkezelési időhöz is találtak nukleusokat (preformed nucleation [11]).

### 3.1.2. A primer szemcsék növekedése

A primer rekristallizáció nukleáció utáni részfolyamata a primer szemcsék növekedése. A növekedés sebessége definíció szerint a rekristallizált szemcsék átmérőjének változási sebességével egyenlő. Állandó hőmérsékleten a primer szemcsék növekedési sebessége jó közelítéssel állandónak tekinthető. Amennyiben feltesszük, hogy a magképződés sebessége is állandó, akkor a rekristallizációs folyamat sebes-



sége (az átalakulási termék  $x$  mennyiségének idő szerinti deriváltja) arányos a még át nem alakult anyag mennyiségével,  $s$  az eltelt idő valamilyen hatványával

$$\frac{dx}{dt} = K(1-x)t^{p-1}, \quad (6)$$

ahol  $K$  és  $p$  a folyamat jellegétől függő, kísérletileg meghatározható állandók. A (6) egyenletet integrálva a  $t=0$ ,  $x=0$  kezdeti feltétel mellett, a következő összefüggést kapjuk:

$$x = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)^p, \quad (7)$$

ahol  $x$  a  $t$  idő alatt rekrisztallizált szemcsék relatív hányada és

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{Q}{kT}\right), \quad (8)$$

ahol  $Q$  a folyamat aktiválási energiája.

A (7) összefüggést Avrami-egyenletnek nevezik.

A  $p$  paraméter értéke attól függően változik, hogy a rekrisztallizáció milyen alakú mintában megy végbe. Elméleti megfontolások alapján „háromdimenziós” rekrisztallizációra  $3 \leq p \leq 4$ , lemez alakú mintában lezajló, „kétdimenziós” folyamatra  $2 \leq p \leq 3$ , „egydimenziósra” pedig  $1 \leq p \leq 2$  értékek adódnak [5]. A gyakorlatban ezeket a  $p$  és  $\tau$  paramétereket általában a kísérletekből szokták megadni.

A rekrisztallizáció *primer szakaszára az jellemző*, hogy a mintának vannak olyan területei, ahol a *deformált és újrakristályosodott anyag együtt megtalálható*. Ez a szakasz befejezettnek tekinthető, ha a szemcsehatár mindkét oldalán újrakristályosodott anyag van.

### 3.2. Szemcsenövekedés

A szemcseszerkezet azonban a primer rekrisztallizáció befejeződése után sem stabil. A legfontosabb hajtóerő — amely a tárolt energiával kapcsolatos — kimerült, de az anyag még tartalmaz szemcsehatárokat, így van határfelületi energiája. Az ideális termodinamikai stabilitás csak akkor valósul meg, ha a minta teljesen egykristályi alakult. A stabilabb állapotra való törekvés ekkor abban nyilvánul meg, hogy az átlagos szemcseméret nő. A szemcsenövekedés a rekrisztallizáció második szakasza (grain growth), melynek során a térfogategységre jutó felület, és ezzel a határfelületi energia csökken. A szemcsenövekedésre már 1947-ben Beck javasolt egy törvényt (izoterm szemcsenövekedési törvény) [12]:

$$\frac{dD}{dt} = kD^{-n}, \quad (9)$$

ahol  $D$  az átlagos szemcseátmérő,  $k$  és  $n$  kísérletileg meghatározandó paraméterek.

A primer rekrisztallizáció után bekövetkező további szemcsenövekedés hajtóereje a szemcsehatár felületi szabadenergiája. Ilyen hajtóerő figyelembevételével elméletileg meghatározható a Beck által tapasztalati úton megadott szemcsenövekedési



törvény [5]. A szemcsenövekedés sebessége ugyanis arányos a hajtóerővel, ezért felírható a következő egyenlet:

$$\frac{dD}{dt} = K \frac{\gamma}{D}. \quad (9a)$$

Az egyenlet integrálásával a

$$D = (kt)^{1/2} \quad (k = 2K\gamma) \quad (9b)$$

ún. normális szemcsenövekedési törvény adódik.

A kísérleti eredményeknek megfelelő törvényt Turnbull nyomán elméletileg is meghatározhatjuk. A nagyszögű szemcsehatárok mozgása az atomi mechanizmus figyelembevételével egyedi atomugrások sorozatával lezajló folyamatként értelmezhető („single process theory”). Egy ilyen folyamat sebessége az alábbi kifejezéssel adható meg [13]:

$$V = \frac{evb}{kT} P \exp \left( + \frac{S}{R} \right) \exp \left( - \frac{Q}{RT} \right), \quad (10)$$

ahol  $v$  az atomugrások frekvenciája,  $e$  a természetes logaritmus alapja,  $b$  a szemcsehatár mérete,  $P$  a hajtóerő, amely egyenlő az egységnyi határfelület egységnyi elmozdulásakor fellépő  $\Delta F$  szabadenergia változással.  $S$ ,  $Q$  az aktiválási entrópia és energia. Ez a kifejezés a következő alakban is írható:

$$V = MP \quad (11)$$

ahol

$$M = \frac{evb}{kT} \exp \left( + \frac{S}{R} \right) \exp \left( - \frac{Q}{RT} \right) \quad (12)$$

a szemcsehatár mozgékonyaság. Látható, hogy a mozgékonyaság a határszerkezet és a hőmérséklet függvénye.

A szemcsehatármozgás szempontjából fontos tényező a hajtóerő. A hajtóerőnek általában három fajtáját különböztetjük meg. Származhat a minta teljes térfogatában folytonosan, egyenletesen elosztott térfogati energiából. A térfogati energia forrása sokféle lehet pl. a deformáció tárolt energiája, rugalmas energia stb. Lehet a folyamat hajtóereje a szemcsehatár felületi energia is. Megmutatták [14], hogy az ilyen típusú hajtóerő a

$$P = \frac{2\gamma}{R} \quad (13)$$

formában adható meg, ahol  $\gamma$  a fajlagos felületi energia,  $R$  pedig a szemcse görbületi sugara. A hajtóerő harmadik forrása a szemcsehatár és az idegen atomok között fellépő kölcsönhatás. Ezt a típust a 4.2. fejezetben részletesen tárgyaljuk.

A kísérleti adatok alapján meghatározott és a (10) elméleti összefüggésből kapott sebességértékek között eltérést találtak [15], ezért Mott úgy módosította Turnbull elgondolását, hogy az atomugrások helyett atomcsoportos mechanizmust tételezett fel („group process theory”) [16]. A szemcsehatár szerkezetét atom „szigetekből” állónak képzelte el, melyek többé-kevésbé rendezetlenül elhelyezkedve alkotják a határt. Egy ilyen határban lejátszódó elemi folyamatban a szemcsehatár egyik oldalán az atomcsoportok „megolvadnak”, a másikon pedig kondenzálódnak. Ennek alapján az aktiválási entrópiára és energiára a következők adódnak:

$$S_A = nS_f, \quad (14)$$

ahol  $S_f$  a fúziós entrópia,  $n$  a kérdéses atomcsoportban levő atomok száma és

$$Q = nL, \quad (15)$$

ahol  $L$  az atomcsoport képződés egy atomra jutó látens hője. Felhasználva az

$$S_f = \frac{L}{T_m} \quad (16)$$

összefüggést, ahol  $T_m$  a  $K^\circ$ -okban kifejezett olvadáspont, (14) a következő lesz

$$S_A = \frac{nL}{T_m} = \frac{Q}{T_m}. \quad (17)$$

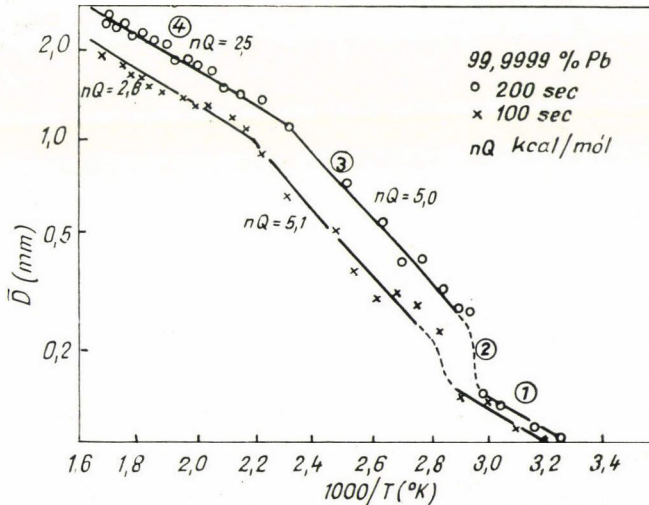
Az aktiválási entrópiára kapott kifejezést a (10) egyenletbe beírva adódik az atomcsoportos modellből számított sebesség:

$$V = \frac{evb}{kT} nP \exp\left(+\frac{Q}{RT_m}\right) \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right). \quad (18)$$

A Mott-féle modellben tehát a hajtóerő is módosul, annak megfelelően, hogy az elemi folyamatban  $n$  darab atom vesz részt. A két elmélet eredményét összehasonlítva *Aust* és *Rutter* Pb—Sn, Pb—Ag, Pb—Au ötvözeteken mért sebességadatok alapján azt találta, hogy nagyságrendben a *Turnbull* által számított sebességgel kapnak egyezést, ha a szennyezőhatás minimális és a mérés elég magas hőmérsékleten történik [17].

### 3.2.1. Szekunder rekristallizáció

*Simpson*, *Aust* és *Winegard* a hőmérséklet függvényében (1971) vizsgálta a szemcsenövekedést [18]. Nagy tisztaságú anyagokon (Pb—Pb ötvözei) végzett izochron hőkezelési vizsgálataik szerint a szemcsenövekedésnek négy szakasza van (5. ábra).



5. ábra. A szemcsenövekedés szakaszai nagy tisztaságú ólomban [18]

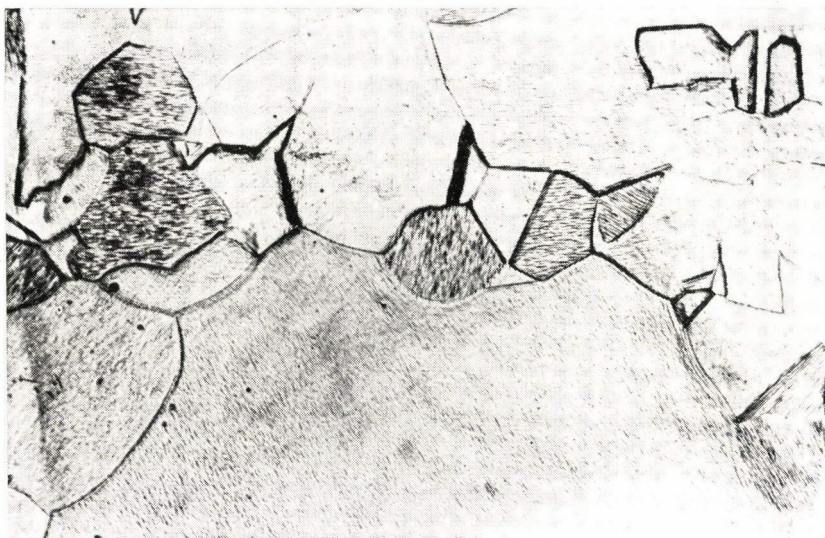


Nagytisztaságú anyagok esetén és az olvadásponthoz közeli hőmérsékleten a  $D=(kt)^{1/2}$  normális szemcsenővekedési törvény szerinti növekedést tapasztaltak. Az ötvözeteken pedig a  $D=(Kt)^n$ ,  $n \neq 1/2$  törvény szerinti szemcsenővekedést állapítottak meg.

A fent említettek azonban csak az 5. ábrán látható három hőmérséklettartományban állnak fenn. Az 5. ábrán szaggatott vonallal húzott tartomány a normálistól eltérő szemcsenővekedésnek felel meg. Ebben a hőmérséklet intervallumban megy végbe a szekunder rekrisztallizáció.

A szekunder rekrisztallizáció nagyon kevésbé tisztázott terület. A kísérleti vizsgálatok eredményei alapján a következőket állapíthatjuk meg. A szekunder rekrisztallizáció a szemcsenővekedési folyamat irreguláris szakasza, amelynek során egyes szemcsék szomszédait magukba olvasztva, a környezetükben levő szemcsék átlagos méretének sokszorosát érik el.

A 6. ábra mikroszkópos felvételén a tipikus szekunder rekrisztallizációs szerkezet, az ún. duplex szövetszerkezet látható. Bár a szekunder rekrisztallizáció jelleg-



6. ábra. A szekunder rekrisztallizációra jellemző duplex szövetszerkezet nagy tisztaságú Pb-ban

zetes tulajdonságait többnyire ismerjük, a folyamat teljes kvantitatív leírása még nem született meg. (A nukleációs szakasz a kevésbé ismert.)

A szekunder rekrisztallizáció legjellegzetesebb sajátosságai a következőkben foglalhatók össze. Az átlagosnál jelentősen nagyobb szemcsék a primer szerkezet egy-egy kitüntetett szemcséjéből keletkeznek. A nagy szemcsék növekedésének első szakasza lassú, azaz van a folyamatnak egy inkubációs periódusa.

A primer szerkezet azon szemcséje, amelynek átmérője sokszorososa lesz a szomszédos szemcseátmérőnek, több szempontból kitüntetett lehet, pl. különbözhethet az orientációja a szomszédjaihoz viszonyítva. A normális szemcsenővekedést megakadályozhatja a minta mérete (pl. lemezvastagság), rekrisztallizációs textúra, diszpergált



fázis jelenléte stb. A szekunder rekrisztallizációs textúra, ha a folyamat teljes, tökéletesen különbözik a primer textúrától [19].

A szekunder rekrisztallizáció izoterm kinetikájára vonatkozóan megállapították, hogy a primer rekrisztallizációhoz hasonló sebességi egyenlet írja le [19]. *Alexander, Dube* és *Rosi* mérési eredményei alapján ugyanis a szekunder szemcsék átmérője konstans sebességgel nő [20], azaz

$$R = V(t - \tau) \quad (t > \tau), \quad (19)$$

ahol  $\tau$  az inkubációs periódus. Másrészt a sebesség hőmérséklet függése a következő

$$V = V_0 \exp \left( -\frac{Q_n}{RT} \right), \quad (20)$$

ahol  $Q_n$  a szemcsehatár-mozgás aktiválási energiája. A szemcsenövekedés mindig szemcsehatármozgással valósul meg, ezért a szemcsenövekedés sebessége most is a

$$V = MP \quad (21)$$

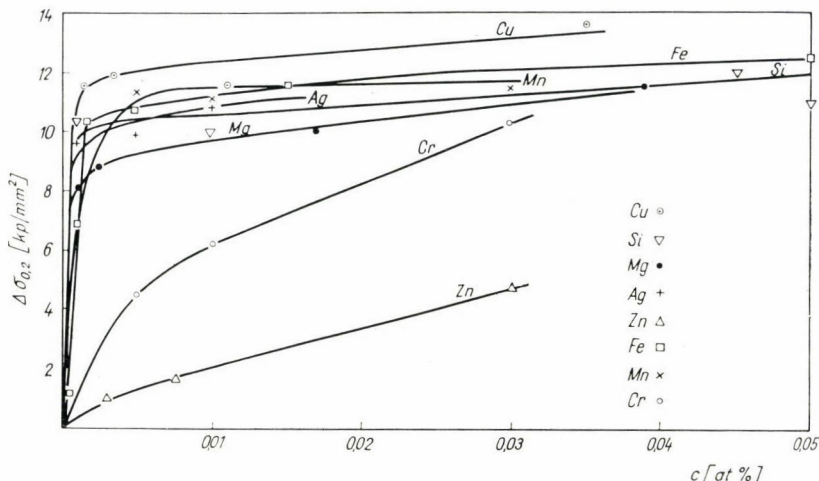
általános sebességi összefüggéssel adható meg, ahol  $M$  a mozgékonyság, mely a határszerkezetre vonatkozó adatokat tartalmaz és függ a hőmérséklettől, a  $P$  hajtóerőtől azonban független. Adott hőmérsékleten  $M$  állandónak vehető. A mérések szerint a szekunder rekrisztallizáció alatt állandó sebesség figyelhető meg, amivel a  $P$ =konstans adódik. Ez azt jelenti, hogy a szekunder rekrisztallizáció folyamán a mátrix szemcseszerkezete teljesen stabil. Kimutatható továbbá, hogy a szekunder rekrisztallizációban nem a mozgékonyság, hanem a hajtóerő a domináns [19].

### 3.2.2. Tercier rekrisztallizáció

Megfelelő körülmények között a szekunder rekrisztallizációt újabb speciális szemcseszerkezet kialakulása követheti. Erre egy példa a következő. Kiterjedt kísérletezés folyt hengerelt Fe—Si ötvözetekkel, amelyekben diszpergált fázisként mangánszulfid zárványok voltak. A diszpergált fázis jelenléte miatt ebben az anyagban speciális szekunder szemcse szerkezet, ún. Goss textúra alakul ki (110) [001] orientációval. Ez a rekrisztallizációs textúra azért fontos, mert a [001] irány a könnyű mágnesezés iránya, ezért a Goss textúra létrejötte esetén az anyag könnyebben mágnesezhető. 1958-ban többen megállapították, hogy a lemezelt Fe—Si ötvözeteket oxigén nyomokat tartalmazó atmoszférában hőkezelve a Goss textúrától eltérő, köbös (001) [100] textúra alakul ki. Az így hőkezelt mintát száraz hidrogénatmoszférába vagy magas vákumba helyezve az előző köbös textúra eltűnt, helyette a Goss textúra alakult ki. Ezt a folyamatot nevezik tercier rekrisztallizációnak [6]. *Shewmon* és *Robertson* munkái alapján megállapítható, hogy a tercier rekrisztallizációt a lemez alakú minta felületén levő szemcsék határfelületi energiájának anizotropiája okozza. Ezt az anizotropiát a hőkezelési atmoszférából adszorbeált szennyezők jelentősen csökkentik, emiatt alakul ki a fentiekben említett kétféle textúra [6].

#### 4. A REKRISZTALLIZÁCIÓT BEFOLYÁSOLÓ TÉNYEZŐK

A rekrisztallizáció eddigi jellemzése nagy tisztaságú, hidegen deformált fémekre vonatkozott. A rekrisztallizációt azonban igen sok tényező befolyásolja. A deformáció mértékének, hőmérsékletének és sebességének változásával a fémekben tárolt energia mennyisége változik, s ezzel a rekrisztallizáció hajtóereje, sebessége stb. jelentősen módosul. Pl. megalakítás (a  $K^\circ$ -okban kifejezett olvadáspont felénel magasabb hőmérsékleten végzett alakítás) esetén a rekrisztallizáció egyes szakaszaira



7. ábra. A folyáshatár növekedés koncentráció függése alakított Al-ban [22]

vonatkozó megállapítások módosulnak [21]. Különösen nagy mértékben befolyásolják a rekrisztallizációt a szennyező anyagok. Már kis szennyezőkoncentráció (1 ppm) is jelentősen növeli a rekrisztallizáció hőmérsékletét. A szennyező anyagi minőségétől függően különböző módon változik a rekrisztallizáció hőmérséklete. Folyáshatárváltozásból meghatározható az egyes ötvöző (szennyező) elemek hatására bekövetkező rekrisztallizációs hőmérsékletváltozás (7. ábra) [22]. Megállapították, hogy a rekrisztallizációs hőmérséklet növekedik, ha nő a szennyezések térfogati diffúziójának aktiválási energiája.

##### 4.1. Precipitációk hatása

Jelentősen függ a szennyezők hatása aszerint, hogy oldott atomokként vagy kiválásokban vannak-e jelen. A kiválásokban levő szennyező hatása a szemcsehatárral statikus jellegű kölcsönhatásban nyilvánul meg. A zárványok (nem egyensúlyi idegen fázisok) is elsősorban a kiválásokhoz hasonló kölcsönhatások révén csökkentik a szemcsenövekedés sebességét.

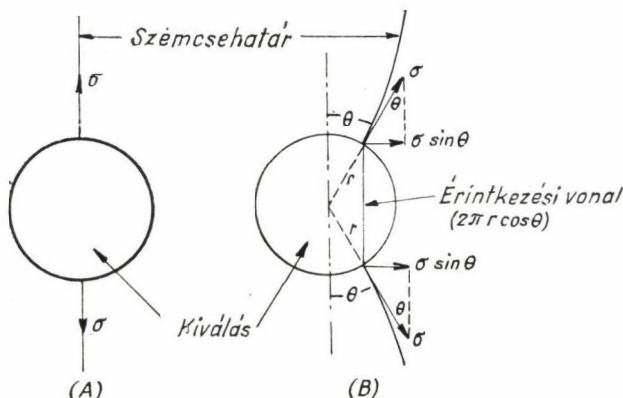
A szemcsehatárra gyakorolt erő meghatározása céljából képzeljünk el egyenletes eloszló gömb alakú zárványokat a mátrixban. A szemcsehatár egy precipitátum-

hoz érkezve megtorpan mozgásában és a precipitátum körül kihajlik (8. ábra). A zárványnak (precipitátumnak) a szemcsehatárral való érintkezési vonala mentén a zárvánnyra ható erő a 8. ábrából meghatározható

$$F = 2r\pi\sigma \sin \theta \cos \theta. \quad (22)$$

Newton III. törvénye értelmében a precipitátum ugyanekkora erővel húzza vissza a mozgó szemcsehatárt, ami a szemcsehatár mozgás sebességének csökkenésében nyilvánul meg [23].

A második fázisban levő részecskék a szemcsenövekedést teljesen meg is akadályozhatják. Ilyen esetben a szemcsenövekedésnek a felületi feszültségből származó



8. ábra

hajtóereje éppen egyensúlyt tart a precipitátum visszahúzó erejével. Egyszerű megfontolásokkal megadható az a maximális  $R$  szemcseméret, amely az  $r$  sugarú precipitátumok jelenlétében kialakulhat:

$$R = \frac{4}{3} \frac{r}{\xi}, \quad (23)$$

ahol  $r$  a precipitátum sugara  $\xi$  a második fázis térfogati hányada [23]. Ez a maximális szemcseméret lehet egy forrása a szekunder rekrisztallizációnak.

#### 4.2. Oldott szennyezők hatása

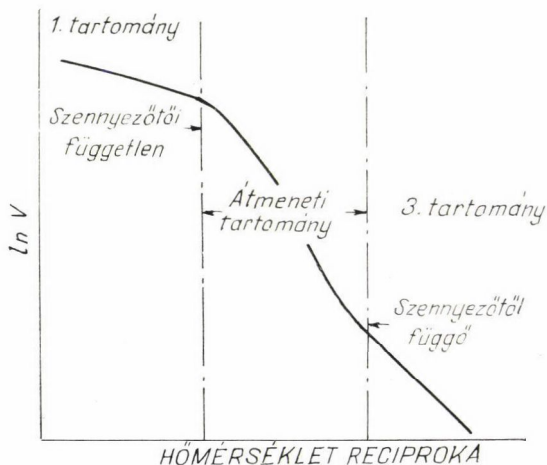
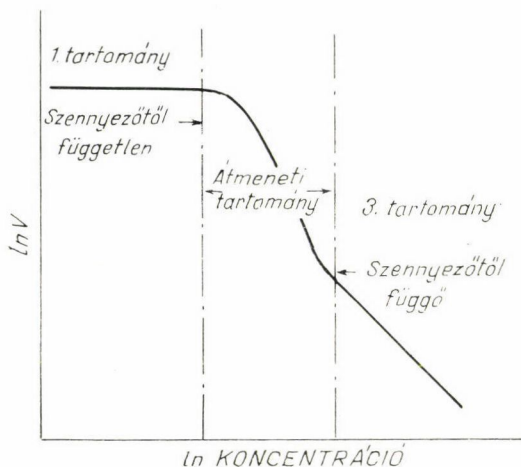
Az oldott szennyező szemcsenövekedésre gyakorolt hatása szintén a szemcsehatármozgás befolyásolásával kapcsolatos. Ennek egy kvantitatív tárgyalását elsőnek Lücke és Detert adta meg [24]. A Lücke—Detert elmélet alapfeltevése szerint a szilárd oldatban levő szennyező kölcsönhat a szemcsehatárral, ezáltal szennyező szegregáció indul meg a szemcsehatáron. Az egyenletesen mozgó határon kialakuló szennyezőkoncentráció hőmérsékletfüggésére a

$$C = C_0 \exp \left( -\frac{E}{RT} \right) \quad (24)$$



kapcsolat adható meg. Itt  $C_0$  a térfogati szennyezőkoncentráció,  $E$  a kölcsönhatási energia. A határ mozgása során magával viszi a szennyezőatmoszférát. A határsebességnek a koncentrációval, valamint a hőmérséklettel való kapcsolatát a Lücke—Detert elmélet a 9. ábrán látható függvény formájában állapítja meg.

Magas hőmérsékleten és kis szennyezőkoncentráció mellett a mozgó határ a szennyezőatmoszférától megszabadulhat (breakaway). Az elmélet állítása szerint ez a leszakadás meghatározott koncentráció és hajtóerő mellett, meghatározott hőmérsékleten, hirtelen folyamatként valósul meg (9. ábra, 1. tartomány). A határmozgás sebességére vonatkozóan ekkor feltehető, hogy független a szennyezőkoncentráció-



9. ábra. A szemcsehatár sebességének sematikus változása a koncentráció és a hőmérséklet függvényében a Lücke—Detert elmélet szerint

tól, s a folyamat aktiválási energiája megegyezik a szemcsehatárban végbemenő öndiffúzió aktiválási energiájával. Ebben a szakaszban a *Turnbull* által megállapított (10) sebességi egyenlet írja le jól a folyamatot.

Nagy szennyezőkoncentráció esetén és alacsony hőmérsékleten az elmélet a szennyezett határmozgás sebességére a

$$V = \frac{P}{RT} \frac{D}{C} \exp \left( -\frac{(Q_L - E)}{RT} \right) \quad (25)$$

egyenletet adja, ahol

$D$  a diffúziós együttható,  $P$  a folyamat hajtóereje,

$Q_L$  a szennyező rácsdiffúziójához szükséges aktiválási energia [3].

Ebben az esetben a sebességet a szennyező határmögötti térfogati diffúziója befolyásolja. Ilyen folyamatra utal a 9. ábrán a 3-sal jelölt szakasz. A (25) egyenletből leolvasható, hogy a gyorsan diffundáló szennyező visszahúzó hatása kisebb, mint a lassúbbé.

A 2-sel jelölt ún. átmeneti tartományra vonatkozóan, amelyben a szemcsehatár már részben megszabadult a szennyezőktől, az elmélet kvantitatíve nem állapít meg semmit. A kísérleti eredményekkel összehasonlítva a következőket mondhatjuk [25]:

- Kis szennyezőkoncentráció mellett, magas hőmérsékleten a mért aktiválási energiaértékek szennyezőmentes határmozgásra engednek következtetni.
- Nagy szennyezőkoncentráció esetén az aktiválási energia, a 9. ábrán látható módon, további szennyezőadagolással nem változik.
- Bolling* és *Winegard* Pb—Sn, Pb—Ag, Pb—Au ötvözeteken mért eredményei szerint a kisebb diffúzióállandójú Sn-nak kisebb szemcsehatársebesség csökkentő hatása van, mint az Ag, ill. Au-nak. Ezt a tényt az elmélet nem tudja megmagyarázni [26].

Ezenkívül egy sor további ellenvetés is tehető a *Lücke*—*Detert* elmélettel szemben.

1. Felteszi, hogy a szemcsehatár sebessége azonos a szennyező diffúziósebességével. 2. A szemcsehatárvándorlás során nem veszi figyelembe a mozgó szemcsehatárban bekövetkező szennyezőkoncentráció változást. 3. Eredményei csak szennyezőadszorpcióra vonatkoznak, tehát csak negatív kölcsönhatási energiára igazak. 4. A szemcsehatár környezetében végbemenő szennyeződiffúzió esetén nem veszi figyelembe a határmenti rácstorzulást (a (25) egyenletben  $Q_L$ , a szabályos rácspan mért diffúzió aktiválási energiája). 5. A szennyező és szemcsehatár  $E$  kölcsönhatási energiája és a szennyező  $D$  diffúziós együtthatójával kapcsolatban nem veszi figyelembe, hogy mindkettő függvénye a határ méretének. 6. A szennyező atmoszféra leszakadására vonatkozó megállapítása nem helytálló, a leszakadás a valóságban nem hirtelen folyamatként valósul meg.

Mindezen ellentmondások feloldására *Lücke* és *Stüwe*, illetve *Cahn* egymástól függetlenül további, új elméletet dolgoztak ki [27].

*Cahn* 1962-ben alkotta meg az ún. „impurity drag” elméletét. Eszerint a szemcsehatármozgás során megfigyelt hatásokért a szennyezőatmoszféra felelős. A szemcsehatárt olyan sík menti diszkontinuitásnak tekinti, amely a szennyező és szemcsehatár között kialakuló  $E(x)$  kölcsönhatási energiával, és a szennyező határbeli diffúziójára jellemző  $D(x)$  diffúziós együtthatóval együtt jellemezhető. Az  $x$  változó a szemcsehatár egy tetszőleges érintősíkjától mért távolságot jelenti. A határ mentén kialakuló szennyezőkoncentráció szintén  $x$  függvénye.

A szennyező atom diffúziója a szemcsehatár potenciál terében történik, ezért a szemcsehatármenti koncentrációt ennek figyelembevételével kell meghatároznunk. Állandó  $V > 0$  sebességgel mozgó határ esetén a szemcsehatármenti szennyezőkoncentrációra a diffúziós egyenletek megoldásával a következő kifejezés adódik:

$$C = C_0 V \exp \left\{ -\frac{E(x)}{kT} - V \int_{x_0}^x \frac{d\eta}{D(\eta)} \right\} \int_{-\infty}^x \exp \left\{ \frac{E(\xi)}{kT} + V \int_{x_0}^{\xi} \frac{d\eta}{D(\eta)} \right\} \frac{d\xi}{D(\xi)}. \quad (26)$$

Ez a megoldás olyan szennyező szemcsehatár kölcsönhatást ír le, amelyben a határfelületnek a szennyezőhöz közelítő részei vesznek részt a szennyező eloszlás kialakításában és nincs hatása a koncentráció eloszlásra a már távolodó részeknek, továbbá a határfelület mögött kialakuló koncentráció  $C_0$ -lal egyenlő. Az összefüggés nem érvényes  $V=0$ -ra, amikor a szennyezőeloszlást a

$$\mu = kT \ln C(x) + E(x) + \text{konst} \quad (27)$$

kémiai potenciál szabja meg az  $E(\infty)=0$  feltétel mellett.

Egy szennyező atom  $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$  erőt gyakorol a szemcsehatárra. Az összes szennyezőatom által a határra kifejtett erő a

$$P_i = -N_v \int_{-\infty}^{+\infty} [C(x) - C_0] \frac{dE(x)}{dx} dx \quad (28)$$

formában adható meg, ahol  $C(x)$  a (26) egyenlet szerint határozható meg,  $C_0$  a térfogati szennyező koncentráció. A (26) egyenletben az  $E(x)$  és  $D(x)$  függvény alakja nem ismert, s az egyenlet bonyolult volta miatt az erőhatást csak határesetekben adhatjuk meg. Két fontos határesetet különböztetünk meg.

Amennyiben a szemcsehatár sebessége sokkal nagyobb a szennyező diffúzió sebességénél, a határt visszatartó erőre a

$$P_i \simeq \frac{C_0 N_v}{kTV} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^2 D(x) dx \quad (29)$$

értéket kapjuk [27]. Kis határsebességre viszont a

$$P_i \simeq 4N_v kTC_0 V \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sinh^2 \frac{E(x)}{2kT}}{D(x)} dx \quad (30)$$

formula adódik [27].

Bevezetve az

$$\alpha = 4N_v kT \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sinh^2 \left( \frac{E(x)}{2kT} \right)}{D(x)} dx \quad (31)$$

és az

$$\frac{\alpha}{\beta^2} = \frac{N_v}{kT} \int_{-\infty}^{+\infty} D(x) \left( \frac{dE(x)}{dx} \right)^2 dx \quad (32)$$



jelöléseket és a fenti (29), (30) egyenletekből olyan egyenletet képezve, mely mindkét határesetet tartalmazza, a visszahúzó erő a következőképpen írható

$$P_i = \frac{\alpha V c_0}{1 + \beta^2 V^2}. \quad (33)$$

Növekvő sebességgel  $P_i$  először nő, a  $\beta V = 1$ -nél elér egy maximumot, s a sebesség további növekedésével csökken. A  $\beta V = \sqrt{3}$  értéknél van egy inflexiós pontja. Ennél

$$\frac{dP_i}{dV} = -\frac{\alpha c_0}{8} \quad (34)$$

és

$$P_i = \sqrt{3} \frac{\alpha c_0}{4\beta}. \quad (35)$$

Szennyezett anyagban a szemcsehatár sebessége a koncentráció, a hőmérséklet és a hajtóerő függvénye. Tiszta anyagra vonatkozóan a már korábban megadott (10), (18) formulákból látható a sebesség és a hajtóerő közötti lineáris kapcsolat. Definiáljuk a tiszta anyagban a  $P_0(V)$  hajtóerőt a következő módon. Legyen a szennyezett anyagban a hajtóerő, amelyet a szennyezőkoncentráció és a sebesség határoz meg  $P(V, C)$ . Különböztessük meg külön a szennyező hatását, melyet  $P_i(V, C)$ -vel jelölünk. Feltéve, hogy a  $P_0$  hajtóerő a vizsgált koncentráció tartományban nem függ a koncentrációtól,  $P_0$  a következőképpen definiálható:

$$P(V, C) = P_0(V) + P_i(V, C), \quad (36)$$

Ez a kifejezés tartalmazza a sebesség, koncentráció és hőmérsékletfüggést egyaránt.

A  $P_0 = \lambda V$  összefüggés felhasználásával, és (36)-ba beírva a szennyező hatásra kapott (33) egyenletet, a hajtóerőre a

$$P = \lambda V + \frac{\alpha c_0 V}{1 + \beta^2 V^2} \quad (37)$$

egyenlet adódik. Az egyenletben  $\lambda$  az ún. intrinsic drag együttható, az intrinsic mozgékonyság reciproka

$$\lambda = \frac{1}{M}. \quad (38)$$

Vizsgáljuk meg részletesen az említett két határesetet. Az első határeset akkor valósul meg, ha teljesül a  $V \ll 1/\beta$ , azaz a határ mozgási sebessége sokkal kisebb a szennyezőatom diffúzió sebességénél. Ekkor a (37) egyenlet a következőképpen módosul

$$P = (\lambda + \alpha c_0) V, \quad (39)$$

ahonnan

$$V = \frac{P}{\lambda + \alpha c_0}. \quad (40)$$

Ezt a feltételt kielégítő kis határsebesség két esetben valósulhat meg. Teljesül, ha kicsi a hajtóerő, vagy ha kicsi a szennyezőtartalom, azaz ha fennáll, hogy

$$\frac{P}{\lambda} < \frac{1}{\beta} \quad \text{és} \quad \frac{P}{\alpha c_0} < \frac{1}{\beta}. \quad (41)$$

A második határesetben a szemcsehatár mozgási sebessége sokkal nagyobb a szennyező diffúzió sebességénél, ezért a (37) egyenlet a következő alakot ölti:

$$P = \lambda V + \frac{\alpha c_0}{\beta^2 V}. \quad (42)$$

A nagy szemcsehatársebesség megvalósul, ha a hajtóerőre és koncentrációra az alábbi feltételek teljesülnek:

$$P \gg \lambda \beta^2 + \alpha c_0, \quad (43)$$

illetve

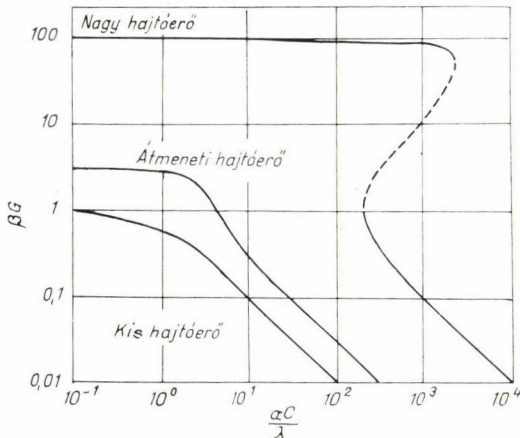
$$C_0 \ll \frac{(P - \lambda \beta^2)}{\alpha}. \quad (44)$$

Kifejezve a (42) egyenletből a határsebességet, és kihasználva a szennyezőkoncentráció kicsiny voltát, a következő kifejezést kapjuk:

$$V = \frac{P}{\lambda} - \frac{\alpha P c_0}{\lambda^2} = \frac{P}{\lambda} \left( 1 - \frac{\alpha c_0}{\lambda} \right). \quad (45)$$

A szemcsehatár sebességére kapott két egyenletből (40), (45), jól látható, hogy a szennyezőhatás jelentősen eltér különböző nagyságú hajtóerők esetén.

A Cahn elmélet alapján a szennyeztelen—szennyezett átmenetnek három fajtáját különböztetjük meg. Ez a három típus látható a 10. ábrán. A 10. ábra a szemcsehatár sebességének változását mutatja a szennyezőkoncentráció függvényében. Az átmenet típusát a hajtóerő szabja meg. Kis hajtóerőnél sima, folyamatos az átmenet



10. ábra. A szennyeztelen—szennyezett átmenet három fajtája a Cahn elmélet szerint

annak megfelelően, hogy a szennyezőatomok fokozatosan fejtik ki hatásukat a szemcsehatárra. Közepes hajtóerő mellett az átmenet még folytonos, de a szemcsehatár sebesség-koncentráció görbének van egy inflexiója. Ez a második átmenet csak ritkán figyelhető meg. A harmadik típusú átmenetet a nagy hajtóerő határozza meg. Ebben az esetben bizonyos koncentrációtartományban három sebességérték elégséges ki a (37) egyenletet. Cahn szerint a középső sebességérték fizikailag nem stabil értéket reprezentál. Az elmélet a nagy hajtóerőhöz tartozó átmeneti tartományban egy adott koncentráció-intervallumban két lehet-

séges szemcsehatár sebességet jósol meg, amelyek között az átmenet nem folytonos. A 10. ábrán látható módon ebben a koncentráció tartományban a görbék átfedik egymást. Felmerül a kérdés, hogy a valóságban, a kísérletekben minek felel meg ez az átfedés.

A szemcsehatár sebesség meghatározásakor makroszkópos mérést végzünk, ezért a megfigyelt viselkedés csak az átlagra ad felvilágosítást. Pl. metallográfiás módszerrel való sebesség meghatározásakor a mérés csak azután történik, miután a határ több ezer atomnyi távolsággal elmozdult. Mozgása során a sebességében bekövetkező lokális fluktuáció nem ismeretes, a mért adatokból csak átlagsebességet tudunk definiálni. Feltehetjük, hogy perturbációk következtében a határ sebessége az elméletben szereplő két sebességérték között oszcillál. A lokális sebességfluktuáció származhat a szennyező koncentráció vagy a hajtóerő változásaiból. Pl. a szemcsehatár egy darabjának sebessége lehet a környezetéhez képest nagyobb, mert pl. kisebb a szennyezőtartalom azon a helyen. Ezért a mozgása során „kihajlik”, lokális görbülete lesz. Elég nagy görbület esetén viszont a lokális hajtóerő is megváltozik, amelynek eredete kétféle lehet. Egyrészt származhat a görbületből, másrészt szolgáltathatja a „kihajlás” felületi energiája. Az így kialakuló felületi nyomás okozhatja például a hurok sebességének csökkenését.

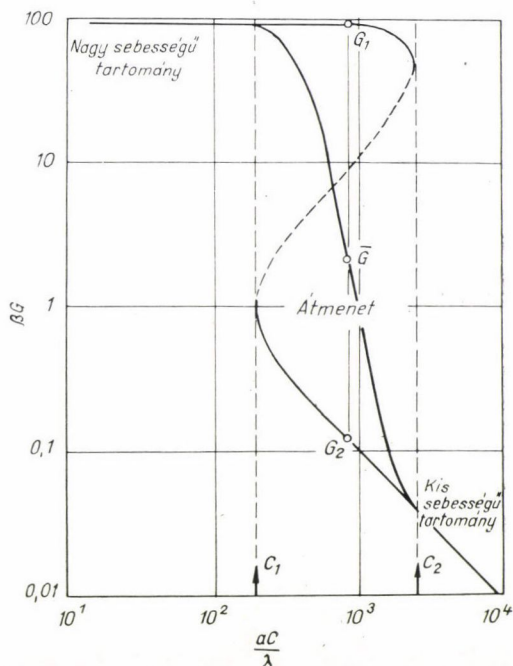
Ez a harmadik tartomány felel meg a Lücke—Detert elméletben is szereplő átmeneti tartománynak. Cahn viszont a tartomány szélességére, azaz az ilyen viselkedéshez megfelelő koncentráció intervallum nagyságára vonatkozóan kvantitatív becslést is ad. A 11. ábrán látható két határ a nagy, illetve a kis sebesség intervallumnak megfelelő  $c_1$  és  $c_2$  koncentrációk közé esik. A számítások eredményeként a koncentráció-intervallumra

$$\frac{2P\beta}{\alpha} \cong c \cong \frac{P^2\beta^2}{4\lambda\alpha} \quad (46)$$

adódik [27].

A szennyezők által szabályozott határmozgás hőmérséklettel való változtatására a folyamat aktiválási energiája jellemző.

Nagy tisztaságú anyag esetén a folyamat aktiválási energiája a szemcsehatárban végbemenő öndiffúzió  $Q_0$  aktiválási energiájának nagyságrendjébe esik, mert



11. ábra. Az átmeneti tartomány szélessége a Cahn elmélet alapján



akkor

$$-\frac{d \ln V}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = -\frac{d \ln \lambda}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = Q_0. \quad (47)$$

Nagy szennyezőkoncentráció esetén azonban az aktiválási energiára a

$$-\frac{d \ln V}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = -\frac{d \ln (\lambda + \alpha c_0)}{d\left(\frac{1}{T}\right)} \cong -\frac{d \ln \alpha}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = Q_\alpha \quad (48)$$

adódik [27].

Az átmeneti tartomány aktiválási energiája a hajtóerő függvénye. Extrém kis hajtóerő mellett a magas hőmérsékleten mért  $Q_0$ -tól az alacsony hőmérsékleten megvalósuló  $Q_\alpha$  értékig folytonosan változik. Extrém nagy hajtóerő esetén az aktiválási energia nem definiált, hiszen az átmeneti tartományban a sebesség nem változik folytonosan. A két határeset között levő tartományban az aktiválási energia elér egy maximumot azon a hőmérsékleten, amelyen a sebességnek inflexiója van. A maximum a következő kifejezés deriváltjának eltüntetésével adható meg [27]:

$$\frac{d \ln V}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = \frac{\frac{d \ln \lambda}{d\left(\frac{1}{T}\right)} - \frac{3\alpha c_0}{16\lambda} \frac{d \ln \beta}{d\left(\frac{1}{T}\right)} + \frac{c_0}{4\lambda} \frac{d \ln \alpha}{d\left(\frac{1}{T}\right)}}{1 - \frac{\alpha c_0}{8\lambda}}. \quad (49)$$

Összefoglalva a Cahn-elméletet, a következőket állapíthatjuk meg.

- Kis határsebesség és konstans szennyezőkoncentráció esetén a (40) egyenletből látható módon a hajtóerő és sebesség között lineáris kapcsolat van. A szennyező hatása ekkor független az  $E(x)$  kölcsönhatási energia előjelétől (31) egyenlet).
- Nagy sebesség esetén a szennyezőhatást az  $\alpha/\beta^2$ -re kapott (32) egyenlet fejezi ki. A (45) egyenletből láthatjuk, hogy itt már csak nagy hajtóerő és kis szennyezőkoncentráció mellett teljesül a linearitás a  $P$ — $V$  között. Megállapítható továbbá az is, hogy a szennyező hatása nagy hajtóerő mellett csökken. Ebben az esetben a nagy diffúzió sebességű szennyező jobban csökkenti a határsebességet.

A Cahn-elmélet tehát egyezésben van azokkal a mérési eredményekkel is, amelyeket Pb—Sn, Pb—Ag, Pb—Au ötvözeteken végeztek.

A teljesen rekristallizált fémekben végbemenő szemcsenövekedésre minden elméleti modellből a  $D=(kt)^{1/2}$  izoterm szemcsenövekedési törvény adódik [5, 28, 29]. Ez a törvény azonban csak igen nagy tisztaságú fémek esetén, illetve olvadásponthoz közeli hőmérsékleten bizonyult igaznak. A szemcsenövekedésre vonatkozó kísérleti eredmények alapján, mely kísérleteket általában ettől eltérő körülmények között végezték, a szemcsenövekedés a  $D=(kt)^n$ , ( $n \neq 1/2$ ) empirikus szemcsenövekedési törvényt követi.

A valóságban a szemcsehatár mindig szennyezett, ezért fontos a szennyezett határmozgás tanulmányozása, hiszen ennek ismerete szükséges ahhoz, hogy a határmozgással megvalósuló szemcsenövekedésre kvantitatív megállapítást tehessünk.

A Cahn elmélet jelenti azt az elméleti alapot, amelyre támaszkodva meghatározhatjuk az izoterm szemcsenövekedési törvényt. Az elméletből ismeretes, hogy amennyiben a szemcsehatár sebessége sokkal kisebb a szennyezőatom szemcsehatárban bekövetkező diffúziójánál, a szemcsehatár sebessége

$$V = \frac{MP}{1 + \alpha CM} = M'P. \quad (50)$$

$M'$ -vel az  $M' = \frac{M}{1 + \alpha CM}$  ún. látszólagos mozgékonytságot jelöljük.

A hajtóerő a szennyezett és tiszta anyagokban általában azonosnak vehető. A szennyezett határ mozgékonytsága azonban kisebb.

A  $V = \frac{dD}{dt}$ , szemcsenövekedési sebesség az átlagos szemcseátmérő időbeni változásával kapcsolatos, ezért felírható a

$$\frac{dD}{dt} = M'P \quad (51)$$

összefüggés.

Az egyenletbe behelyettesítve a hajtóerőre megismert

$$P = \frac{\gamma}{D} \quad (52)$$

összefüggést, s az így kapott differenciál-egyenletet megoldva a

$$D^2 = (2\gamma M' t) \quad (53)$$

izoterm szemcsenövekedési törvényt kapjuk [30]. Ha a kísérleti megfigyelések során a  $D_0$  kezdeti szemcseméret számottevő, az (53) egyenlet helyett a

$$D^2 - D_0^2 = K_1(t - t_0) \quad (54)$$

írható, ahol  $K_1 = 2\gamma M'$ .

A Cahn elmélet másik,  $V \gg \frac{1}{\beta}$  határesetében a sebesség

$$V = MP - \frac{\alpha C}{\beta^2 P}. \quad (55)$$

Megismételve az előző gondolatmenetet a  $P = \frac{\gamma}{D}$  helyettesítéssel

$$D \frac{dD}{dt} = M\gamma - D^2 \frac{\alpha C}{\beta^2 \gamma} \quad (56)$$

differenciálegyenletet kapjuk. Megoldva az egyenletet, a szemcsenövekedési törvény a

$$D^2 = \frac{M\gamma^2 \beta^2}{\alpha C} \left\{ 1 - \exp \left( - \frac{2\alpha C}{\beta^2 \gamma} t \right) \right\} \quad (57)$$

alakot ölti [30].

Az (57) egyenletből látható, hogy a szemcseméret limitált, s a határértéke a szennyező diffúziós együtthatójával fordítottan arányos. Az elméletből kapott (57) szemcsenövekedési törvény jól egyezik a kísérleti tapasztalatokkal [30].

A kísérleti megfigyelések szerint, a szennyező minőségétől függ, hogy melyik szemcsenövekedési törvény írja le jól a valóságot. A szemcsenövekedési törvények érvényességi köre egyszerűen behatárolható az ún. megoszlási hányados segítségével. A megoszlási hányados meghatározza az egymással egyensúlyban levő szilárd és folyadékfázisban oldott szennyezőkoncentráció arányát. A  $k_0$  megoszlási hányados definíció szerint a szilárd fázisban oldott szennyezőkoncentráció és a folyadékfázisban oldott szennyezőkoncentráció hányadosa. A kísérletek azt mutatják, hogy a  $k_0 < 1$  esetben a (53), a  $k_0 > 1$  esetben viszont (57) egyenlet írja le jól a szemcsenövekedést. Megállapítható tehát, hogy szennyezők jelenlétében egységes szemcsenövekedési törvény nem adható meg [30].

Fontos megemlíteni, hogy a  $k_0 > 1$  típusú szennyezők jelenlétében a szemcsehatármozgás aktiválási energiája és a mozgékonyosság is azonos a szennyezőmentes határmozgásnál megfigyelt értékkel. Ebből arra következtethetünk, hogy a határmozgás mechanizmusa sem változik ilyen típusú szennyezők esetén, csupán a folyamat hajtóereje különbözik a szennyezőmentes esethez képest. Ezt a megállapítást igazolják Taylor és munkatársai Sn—Sb rendszeren végzett mérései [31].

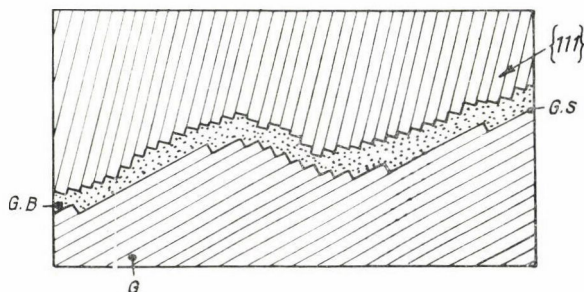
#### 4.3. A szemcsehatármozgás függése az orientációtól

A szemcsehatármozgás mechanizmusára vonatkozó fejezetben tárgyalt elméleti megfontolások szerint a szemcsehatármozgást eredményező elemi folyamat az atomok (atomcsoportok) diffúziója. Az egyes szerzők számításai során az atomugrásokat függetlennek tekintették egymástól, így a szemcsehatár sebességét is függetlennek találták a szemcsehatár két oldalán levő szemcse orientáció viszonyától [32].

A kísérleti eredmények azonban igen szoros kapcsolatot állapítottak meg a szemcsehatár sebessége és a szemcsék szemcsehatárhoz viszonyított orientációja között [33, 4].

A kísérlet és az elmélet között meglevő ellentmondás bizonyítja, hogy a szemcsehatármozgás elméleti modellje nem helyes. A kísérletekből következik tehát, hogy a szemcsehatáron keresztül megvalósuló atomi mozgás nem független a szemcsék orientációjától. Elektronmikroszkópos megfigyelések alapján Gleiter 1969-ben értelmezte a nagyszögű szemcsehatármozgás mechanizmusát [34]. Közvetlen megfigyelés alapján megállapítható, hogy a szemcsehatár lépcsőhöz hasonló szerkezettel rendelkezik [34]. A lépcsők magassága Al—Cu ötvözetben a mérések szerint 3—25 Å.

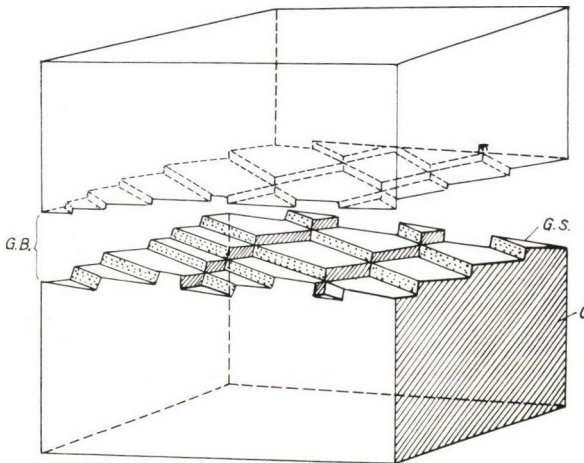
A felvételek geometriai kiértékelése alapján megállapították, hogy a szemcsehatárban „látható” lépcsők kialakításában speciális rácssíkok vesznek részt. Az f.c.c.



12. ábra. Szemcsehatár menti lépcsők f.c.c. fémekben



szerkezetű fémekben azt találták, hogy a lépcsőket többnyire a szemcse  $\{111\}$  síkjainak a szemcsehatárral való metszései alkotják (12. ábra). Egy mozgásra képes szemcsehatár modellje látható a 13. ábrán. A mozgó szemcsehatár elektronmikroszkópos megfigyelésekor kiderült, hogy a lépcsők alkotta szemcséfelület spirál mechanizmussal formálódik, hasonlóan a folyadék, ill. gőzfázisban történő kristálynövekedéshez. A polikristályos fémekben végbemenő szemcsenövekedés tehát teljesen hasonló mechanizmussal történik, mint a spirálteraszos kristálynövekedés. A szemcsehatár mozgása a következő megfontolással értelmezhető. A szemcsehatár egyik „oldalán” levő lépcsők atomokat emittálnak a szemcsehatárba. A két szemcse közötti tartományból viszont atomok abszorbeálódnak a szemcsehatár másik oldalán.



13. ábra. Mozgásra képes szemcsehatár modellje

Az emisszió kétféle módon történhetne. Elképzelhető, hogy teljesen statisztikusan történik, de elképzelhető az is, hogy az atomok mindig a szemcsehatár egyes speciális pontjaiból lépnek ki. Elektronmikroszkópos megfigyelések bizonyítják, hogy a szemcsehatármozgás a lépcsők által alkotott merev rácshoz hasonló szerkezetnek kollektív mozgásával valósul meg.

Ennek alapján a következő modell adható. A szemcsehatárt alkotó két szemcse felülete olyan lépcsők szuperpozíciójából áll, amelyeket a szemcsék  $\{111\}$  síkjai képeznek (f.c.c. fémekben). Ezek a lépcsők felelősek a szemcsehatármozgásért. A hajtóerő hatására összehúzó szemcse felületéről atomok emittálódnak a szemcsehatárba. A növekedő szemcse lépcsőinél ugyanolyan számú atom abszorbeálódik a szemcsehatárból, mint amennyit a csökkenő szemcse emittált. Ez az abszorpciós-emissziós mechanizmus eredményezi a két szemcse felületén levő lépcsők mozgását. A kristálynövekedéssel kapcsolatos ismereteink szerint az emisszió és abszorpció a lépcsők „könyökénél” valósul meg.

A rekristallizáció folyamán megvalósuló szemcsenövekedésre vonatkozó megfigyelésekből ismeretes, hogy a szemcsenövekedés sebessége szigorúan anizotrop. A növekedő szemcse határa bizonyos kristálytani síkokkal párhuzamos, Al-ban ezek az  $\{111\}$  síkok [34].

A fent említett modell segítségével ezek a megfigyelések értelmezhetők. Az f.c.c. fémekben az  $\{111\}$  síkok alkotják a növekedő lépcsőket, ezért a növekedés sebessége ezen síkokra merőleges irányban minimális. Ezért az egységesen orientált mátrixban növekedő szemcsék arra törekednek, hogy a felületüket  $\{111\}$  síkok határolják. Már korábban megfigyelték, hogy a speciális nagyszögű szemcsehatárok, mint a koherens ikerhatárok mozgékonyasága nagyon kicsi, gyakorlatilag nulla [33]. Gleiter modelljéből nagyon könnyen értelmezhető ez a tapasztalat. Az f.c.c. fémekben a koherens ikerhatárok az  $\{111\}$  síkokkal párhuzamosak, ezért az ilyen határok gyakorlatilag nem tartalmaznak lépcsőket, következésképpen nem képesek mozogni.

Gleiter a fent említett modellre építve, kvantitatíve is leírta a szemcsehatármozgást [35]. A leírásban alkalmazott megfontolásai azonban csak szigorúan nagytisztaságú anyag esetén érvényesek.

#### IRODALOM

1. I. Kovács—L. Zsoldos, Dislocations and Plastic deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
2. P. G. Shewmon, Recrystallization, Grain Growth and Textures, American Society for Metals—Metals Park, Ohio 1966. p. 165.
3. P. Gordon and R. A. Vandermeer, Recrystallization Grain Growth and Textures, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1966. p. 205.
4. K. T. Aust and J. W. Rutter, Recovery and Recrystallization of Metals, Interscience, New York, 1963. p. 131.
5. J. E. Burke and D. Turnbull, Progr. in Metal Physics 3, 220, 1952.
6. R. W. Cahn, Physical Metallurgy, ed. R. W. Cahn, New York, 1971. p. 1129.
7. E. Orowan, Dislocations in Metals, AIME, New York, 1954. p. 181.
8. Hsun Hu, Recovery and Recrystallization of Metals, Interscience, New York, 1963. p. 311.
9. J. E. Bailey and P. B. Hirsch, Proc. Roy. Soc. A267, 11, 1962.
10. P. Tardy and S. S. Iskander, J. Mater. Sci. 4, 353, 1969.
11. R. W. Cahn, Proc. Roy. Soc. 63A, 323, 1950.
12. P. A. Beck, I. C. Kremer, L. J. Demer and M. L. Holtzworth, Trans. AIME, 175, 372, 1948.
13. D. Turnbull, Trans. AIME, 191, 661, 1951.
14. P. A. Beck, Advances in Physics, 2, 245, 1954.
15. K. T. Aust and J. W. Rutter, Trans. AIME, 215, 119, 1959.
16. N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. 60, 391, 1948.
17. J. W. Rutter and K. T. Aust, Trans. AIME, 218, 682, 1960.
18. C. J. Simpson, K. T. Aust and W. C. Winegard, Met. Trans. 2, 987, 1971.
19. D. G. Dunn and J. L. Walter, Recrystallization, Grain Growth and Textures, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1966. p. 461.
20. F. D. Rosi, B. H. Alexander and C. A. Dube, Trans. AIME, 194, 189, 1952.
21. J. J. Jonas, C. M. Sellors and W. J. McG. Tegart, Metallurgical Reviews, 14, 1, 1969.
22. Kovács-Csetényi, E. Kandidátusi értekezés, 1974.
23. R. E. Reed-Hill, Physical Metallurgy Principles, New York, Van Nostrand, 1964. p. 175.
24. K. Lücke and K. Detert, Acta Met. 5, 628, 1957.
25. K. T. Aust and J. W. Rutter, Trans. AIME, 215, 820, 1959.
26. G. F. Bolling and W. C. Winegard, Acta Met. 6, 288, 1958.
27. J. W. Cahn, Acta Met. 10, 789, 1962.
28. K. Lücke and H. P. Stüwe, Recovery and Recrystallization of Metals, Interscience, New York, 1963. p. 171.
29. P. Feltham, Acta Met. 5, 99, 1957.
30. M. Hillert, Acta Met. 13, 227, 1965.
31. O. K. Chopra and P. Niessen, Acta Met. 21, 451, 1973.
32. B. Taylor, E. L. Holmes and W. C. Winegard, Can. Met. Quart. 1, 187, 1962.
33. C. D. Graham and R. W. Cahn, Trans. AIME, 206, 517, 1956.
34. B. K. Liebmann, K. Lücke and G. Masing, Z. Metallk. 47, 57, 1956.
35. H. Gleiter, Acta Met. 17, 565, 1969.
36. H. Gleiter, Acta Met. 17, 853, 1969.



# VARIÁCIÓS ELVEK A FIZIKÁBÁN\*

NAGY KÁROLY

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

A dolgozat bemutatja a variációs elvek lényegét, azok szerepét a fizika alaptörvényeinek levezetésében, majd rámutat arra a hibára és félreértésre, amely a termodinamika — *Gyarmati Istvántól* származó — integrálevében rejlik.

1. Elméleti fizikai tanulmányaink során először a mechanikában találkozunk variációs elvvel. Ez az ún. *Hamilton-elv* [1]. Egyszerűség kedvéért foglalkozunk egyetlen anyagi pont mozgásának leírásával. Az  $m$  tömegű pont helykoordinátáit jelöljük  $q_1$ -,  $q_2$ -,  $q_3$ -mal. Ezek a koordináták a tömegpont mozgása során folytonosan változnak, tehát az időnek folytonos függvényei:  $q_k(t)$ ,  $k=1, 2, 3$ . A dinamika alapfeladata e koordinátáknak, mint az idő függvényeinek a meghatározása adott erőhatás mellett. A törvény, amely a mozgást leírja, a dinamika alapegyenlete, az ún. mozgásegyenlet. Ezt a legáltalánosabb alakban a Hamilton-elv adja meg. Eszerint a mozgás a  $t_1$  és  $t_2$  időpontok között úgy megy végbe, hogy az

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} L dt \quad (1)$$

ún. hatásintegrál szélső értéket vesz fel.  $L$  a tekintett fizikai rendszer — a mi egyszerű esetünkben az anyagi pont — Lagrange-függvényét jelenti. Konzervatív erő hatása alatt mozgó tömegpont esetén a Lagrange-függvény a mozgási és a helyzeti energia különbségével egyezik meg. Általában  $L$  a  $q_k$  koordinátáknak, a  $\dot{q}_k$  sebességkomponenseknek és az időnek a függvénye. A szokásos rövid jelöléssel:  $L(q_k, \dot{q}_k, t)$ . Itt  $q_k$  és  $\dot{q}_k$  alatt valamennyi  $q_k$  és  $\dot{q}_k$  értendő.

Jelöljük  $q_k(t)$ -vel azokat a koordináta függvényeket, amelyek a valóságban bekövetkező mozgásnak felelnek meg. A  $t_1$  időpontban vett  $q_k(t_1)$ -et  $q_k^{(1)}$ -gyel, a  $t_2$  időpontban vett értékét pedig  $q_k^{(2)}$ -vel jelöljük. A  $q_k^{(1)}$ -et és  $q_k^{(2)}$ -t ( $k=1, 2, 3$ ) a koordinátatérben egy-egy pont ábrázolja. A két időpont közötti mozgást leíró  $q_k(t)$  függvényeknek a  $q_k^{(1)}$ -et és  $q_k^{(2)}$ -t összekötő folytonos vonal felel meg. Ez a mozgás pályája. Gondoljunk el más lehetséges — tehát a kényszerfeltételeket kielégítő — pályákat úgy, hogy  $q_k(t)$ -hez minden  $t$  időpontban hozzárendelünk egy másik pontot. Ennek koordinátáit  $\bar{q}_k(t)$ -vel jelöljük:

$$\bar{q}_k(t) = q_k(t) + \delta q_k. \quad (2)$$

A  $\delta q_k$  megváltozásokat végtelen kicsiknek tekintjük és megköveteljük, hogy a kény-

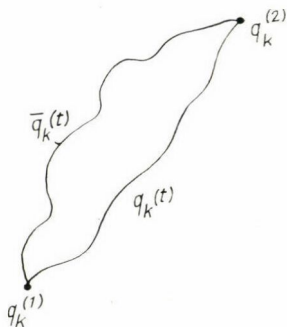
\*Érkezett 1975. május 26.



szerfeltételeket elégítsék ki. A kezdő- és végpontot változatlanul hagyjuk, vagyis:

$$\delta q_k(t_1) = \delta q_k(t_2) = 0. \quad (3)$$

A  $\bar{q}_k(t)$  függvényekkel leírt pályákat nevezzük variált pályáknak, a  $\delta q_k$  megváltozásokat pedig a  $q_k$  koordináták variációjának. A Hamilton-elv ezek után a következőképpen fogalmazható meg. *A valóságos pályán történő integráláskor az  $\mathcal{S}$  hatásintegrál szélső értéket vesz fel a variált pályákon számított integrálértékekhez képest.* A valóságos pályáknak ez a kitüntetett szerepe teszi lehetővé azok meghatározását. Nevezetesen, azokat a  $q_k(t)$  függvényeket keressük, amelyek a hatásintegrált szélső értéké teszik. A variációszámításból ismeretes, hogy (1) szélső értékének feltétele az  $\mathcal{S}$  hatásintegrál  $\delta \mathcal{S}$  variációjának az eltűnése.



$$\delta \mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{k=1}^3 \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) dt = 0. \quad (4)$$

Mivel (2) szerint  $q_k(t)$ -hez az ugyanazon időpontban vett  $\bar{q}_k(t)$ -ket rendeljük, tehát az időt nem variáljuk, könnyen belátható, hogy

$$\delta \dot{q}_k = \frac{d}{dt} \delta q_k. \quad (5)$$

Ezt beírva (4)-be, parciális integrálással kapjuk:

$$\delta \mathcal{S} = \sum_{k=1}^3 \left[ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \sum_{k=1}^3 \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k dt = 0.$$

A kiintegrált rész a (3) határfeltételek miatt eltűnik. A  $\delta q_k$  variációk tetszőlegesek, ezért az integrál csak úgy lehet zérus, ha a zárójeles kifejezések mind eltűnnek:

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (6)$$

Ezek az ún. Euler—Lagrange-egyenletek. A hatásintegrált tehát azok a  $q_k(t)$  függvények teszik szélső értéké, amelyek az Euler—Lagrange-egyenletek megoldásai. A (6) egyenletek a mechanika mozgásegyenletei. Könnyen belátható, hogy ezek a Newton-féle egyenletekkel teljesen egyenértékűek.

Ha nem egy anyagi pont, hanem  $N$  tömegpontból álló pontrendszer mozgását tanulmányozzuk, akkor az Euler—Lagrange egyenletek száma  $3N$ , tehát a (6) képletben a  $k$  index végigfut az  $1, 2, \dots, 3N$  értékeken.

A variálás fenti módjával kapcsolatban teszünk egy megjegyzést, amelynek a későbbiekben lesz szerepe. A variált pályákat úgy kaptuk, hogy a  $q_k$  koordinátákat megváltoztattuk, de a végpontokat változatlanul hagytuk. *A variált pályák csak akkor kezdődnek és végződnek ugyanazon  $q_k^{(1)}$  és  $q_k^{(2)}$  pontokban, ha a  $\dot{q}_k$  sebességkomponenseket is megváltoztatjuk.* Ez szemléletesen látszik az ábrából. Mivel a sebesség a pálya érintője, ugyanazon kezdőpontból ugyanazon végpontba más pályákon csak úgy juthatunk el, ha a  $\dot{q}_k$  sebességkomponenseket is megváltoztatjuk, tehát  $q_k$ -val

együtt a  $\dot{q}_k$ -ot is variáljuk. A (3) határfeltételekkel tehát nem egyeztethető össze olyan mesterkélt variálás, amelynél  $\delta q_k \neq 0$ , de  $\delta \dot{q}_k = 0$ !

2. A variációs elv nemcsak a mechanikában szolgáltatja a mozgástörvényt, hanem a fizika más területein is. Ennek bemutatására tekintsünk egy klasszikus tér-elméletet, pl. az elektromágnesség Maxwell-féle elméletét. A térmennyiségeket jelöljük  $\Phi_i$ -vel. Az  $i$  index a térmennyiség komponenseit jelöli. Az elektrodinamikában  $\Phi_i$  alatt az elektromágneses potenciálokat (a vektorpotenciál három komponensét és a skalárpotenciált) értjük.  $\Phi_i$  a helykoordinátáknak és az időnek a függvénye. Ha a szokásos módon  $x_k$ -val jelöljük a pont három ( $k=1, 2, 3$ ) helykoordinátáját, akkor  $\Phi_i(x_k, t)$ . A  $\Phi_i$ -nek megfelelő fizikai teret jellemző Lagrange-függvény ebben az esetben egy térfogati integrállal állítható elő:

$$L = \int_V \mathcal{L} dV. \quad (7)$$

Az  $\mathcal{L}$  Lagrange-sűrűség a  $\Phi_i(x_k, t)$  térmennyiségektől és azok  $\frac{\partial \Phi_i}{\partial t}$ ,  $\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}$  deriváltjaitól függ:

$$\mathcal{L} \left( \Phi_i, \frac{\partial \Phi_i}{\partial t}, \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} \right).$$

A fizikai tér mozgástörvényét kifejező egyenleteket most is az

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \mathcal{L} dV dt \quad (8)$$

hatásintegrál variációjának az eltűnése szolgáltatja.

A variálás módja a következő. Az  $x_k$  pontban  $t$  időpillanatban vett  $\Phi_i(x_k, t)$  mennyiségekhez hozzárendeljük az ugyanezen pontban és időben vett  $\bar{\Phi}_i(x_k, t)$  függvényt:

$$\bar{\Phi}_i(x_k, t) = \Phi_i(x_k, t) + \delta \Phi_i. \quad (9)$$

A  $\delta \Phi_i$  variációktól megköveteljük, hogy a tekintett térfogat határán, valamint a  $t_1$  és a  $t_2$  időpontokban tűnjenek el:

$$\left. \begin{aligned} \delta \Phi_i(\text{határon}) &= 0, \\ \delta \Phi_i(t_1) &= \delta \Phi_i(t_2) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

A  $\Phi_i$  térmennyiségek (9) variálása a (8) hatásintegrál

$$\delta \mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_i \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} \delta \Phi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} \delta \dot{\Phi}_i + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \delta \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} \right) dV dt \quad (11)$$

variációjához vezet. Mivel (9) szerint az időt és a helykoordinátákat nem variáljuk, ezért

$$\left. \begin{aligned} \delta \dot{\Phi}_i &= \frac{\partial}{\partial t} \delta \Phi_i, \\ \delta \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \delta \Phi_i. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Az integrandusz második és harmadik tagját átalakítjuk:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} \delta \dot{\Phi}_i = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} \delta \Phi_i \right) - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} \delta \Phi_i, \quad (13)$$

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \delta \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \delta \Phi_i \right) - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \delta \Phi_i. \quad (14)$$

Ezeket visszaírva a (11) integrálba, kapjuk:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{S} = & \int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_i \left[ \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \right) \delta \Phi_i + \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} \delta \Phi_i \right) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \delta \Phi_i \right) \right] dV dt. \end{aligned} \quad (15)$$

Az idő szerint vett differenciáhányados integrálja a (10) feltételek miatt eltűnik. Az utolsó tag Gauss-tétellel felületi integrállá alakítható:

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_i \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \delta \Phi_i \right) dV dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_F \sum_i \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} n_k \delta \Phi_i dF. \quad (16)$$

$n_k$  a felület külső normálása irányába mutató egységvektor  $k$ -adik komponense. Mivel (10) szerint a  $\delta \Phi_i$  variációk a határfelületen eltűnnek, ezért (16) jobb oldala zérus.

A hatásintegrál variációja tehát:

$$\delta \mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_i \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} \right) \delta \Phi_i dV dt. \quad (17)$$

A  $\delta \Phi_i$  variációk tetszőlegesek, ezért a  $\delta \mathcal{S} = 0$  egyenletből következik, hogy a zárójeles kifejezésnek el kell tűnnie:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}} = 0. \quad (18)$$

Ezek az ún. Euler—Lagrange-egyenletek a  $\Phi_i$  térmennyiségeket meghatározó tér-egyenletek. Számuk megegyezik a  $\Phi_i$  komponensek számával.

Az elektrodinamikában  $\Phi_1 = A_x$ ,  $\Phi_2 = A_y$ ,  $\Phi_3 = A_z$ ,  $\Phi_4 = \Phi$ , ahol  $\mathbf{A}(A_x, A_y, A_z)$  a vektorpotenciál,  $\Phi$  pedig a skalár potenciál. A  $\mathbf{j}$  áramsűrűség és a  $\varrho$  töltéssűrűség által keltett elektromágnes tér Lagrange-sűrűsége:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} \left[ \left( -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} - \text{grad } \Phi \right)^2 - (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] + \frac{1}{c} \mathbf{j} \mathbf{A} - \varrho \Phi. \quad (19)$$



Az ezzel képzett hatásintegrál variációjának eltűnése (18) szerint a következő egyenletekhez vezet:

$$\left. \begin{aligned} \Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \text{grad} \left( \text{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c} \dot{\Phi} \right) &= -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \\ \Delta \Phi - \frac{1}{c^2} \ddot{\Phi} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( \text{div} \mathbf{A} + \frac{1}{c} \dot{\Phi} \right) &= -4\pi \varrho. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Ezek az elektromágneses potenciálokat meghatározó egyenletek. Elektrodinamikai tanulmányainkból ismerjük, hogy (20) a Maxwell-egyenletekkel ekvivalens.

Az előző pont végén tett megjegyzés a térelméleti variációs elvnl is igaz. Nevezetesen, a térmennyiségek (9) variációja és a (10) határfeltételek csak abban az esetben egyeztethetők össze, ha a  $\Phi_i$ -ot és a  $\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k}$  deriváltakat is variáljuk.

3. A variációs elv használata az elméleti fizikában igen elterjedt. Ennek nemcsak az az oka, hogy a mozgástörvényt egységes módon szolgáltatja, hanem elsősorban az, hogy az alaptörvényeket a koordinátarendszer választásától függetlenül adja. A hatásintegrál ugyanis invariáns skalár.

A variációs elv alkalmazásánál egyedül a rendszert jellemző Lagrange-függvényt kell ismernünk és belőle a fenti eljárással adódnak a mozgásegyenletek, illetve a téregyenletek. A Lagrange-függvény ismeretében definiálhatók a kanonikus változó-párok is, amelyekkel nemcsak a mechanika kanonikus tárgyalása építhető ki, hanem a kvantummechanika is megalapozható. A Heisenberg-féle felcserélési törvények ugyanis az egymáshoz kanonikusan konjugált mennyiségekhez rendelt operátorokra vonatkoznak. A fizikai terek kvantumelméletének az ún. kvantumtérelméletnek is ez az alapja. Minden térelmélet az illető fizikai térre jellemző Lagrange-függvény megadásával kezdődik.

Ha a variációs elvet az általános relativitás elméletnek megfelelően kovariáns alakban írjuk fel, akkor a Lagrange-függvény tartalmazni fogja a  $g_{ik}$  metrikus tenzort is. A hatásintegrálnak a  $g_{ik}$  szerinti variációjából adódik a tér energia-impulzus-tenzora, amely tartalmazza az energia-, az impulzus- és az energiaáramsűrűség kifejezéseit. *A variációs elvek tehát nemcsak a mozgástörvényeket, hanem a rendszerre jellemző dinamikai mennyiségek (energia, impulzus) kifejezéseit, és az ezekre vonatkozó megmaradási tételeket is szolgáltatják.* Ezért van a variációs elveknek az elméleti kutatásokban rendkívül fontos szerepük és jelentőségük.

4. A termodinamikában is találkozunk olyan próbálkozásokkal, amelyek a nem-egyensúlyi termodinamika fontosabb egyenleteit kapcsolatba hozzák bizonyos integrálok szélső értékeivel. A stacionárius folyamatokra valóban megadhatók Lagrange-függvények, amelyekkel felírt variációs elv a megfelelő stacionárius folyamat alapegyenletéhez vezet. Példaként tekintsük a hővezetést szilárd anyagban. A stacionárius hőáramlás Lagrange-függvénye [2]:

$$L = \int_V \mathcal{L} dV, \quad (21)$$

ahol

$$\mathcal{L} = \frac{\lambda}{2} (\text{grad } T)^2. \quad (22)$$

A  $\lambda$  hővezetési együtthatóról az egyszerűség kedvéért feltételezzük, hogy független

a  $T$  hőmérséklettől. Stacionárius hőáramlás esetén a  $T$  hőmérséklet csak a helykoordináták függvénye, az időtől független.

A  $T$  hőmérsékletet variálva, (18) alapján kapjuk:

$$\operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) = 0. \quad (23)$$

Ez valóban a stacionárius hőáramlást leíró egyenlet; ugyanis a hővezetés

$$\varrho C_v \frac{\partial T}{\partial t} - \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) = 0 \quad (24)$$

egyenlete stacionárius esetben  $\left(\frac{\partial T}{\partial t} = 0\right)$  a (23)-ba megy át. Itt  $C_v$  a fajhőt,  $\varrho$  pedig a tömegsűrűséget jelenti.

A hővezetéshez hasonlóan más stacionárius áramlási folyamatok, (pl. diffúzió) alapegyenletei is levezethetők variációs elvből. A nem stacionárius, tehát időtől függő termodinamikai folyamatok esetén azonban nem ez a helyzet. Az ilyen általános áramlási folyamatok alapegyenletei általában nem vezethetők le variációs elvből. A könnyebb megértés érdekében tekintsük ismét a hővezetést szilárd közegben. A  $T$  hőmérséklet időbeli változását és hely szerinti eloszlását meghatározó (24) egyenlet nem Euler—Lagrange egyenlete valamely variációs elvnek. Más szóval: *nem létezik olyan Lagrange-függvény, amellyel felírt hatásintegrált a hővezetés (24) egyenletét kielégítő  $T(\mathbf{r}, t)$  függvény szélső értékévé tenné.* Általában igaz, hogy a

$$\frac{\partial f(\Phi)}{\partial t} - \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} \Phi) = 0 \quad (25)$$

típusú egyenletek csak azon speciális esetekben adódnak variációs elvből, ha az  $f(\Phi)$  függvény a  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  variálandó mennyiségtől független. Az egyenlet első tagját — a  $\frac{\partial f}{\partial t}$ -t — variációs elvből kétféleképpen lehetne megkapni. 1. A Lagrange-függ-

vényben  $\frac{\partial f}{\partial t}$  szorozva van  $\Phi$ -vel:  $\frac{\partial f}{\partial t} \Phi$ , és a  $\Phi$  variálása (18) első tagja szerint szolgáltatta a keresett  $\frac{\partial f}{\partial t}$ -t, ha az  $f$  a  $\Phi$ -tól független. 2. Másik lehetőség az, hogy

$L$ -ben szerepel egy  $f\dot{\Phi}$  tag. Ekkor (18) második tagja adja a (25) egyenlet első tagját, ha az  $f$  független  $\Phi$ -tól. Mindkét esetben fel kell tehát tételeznünk, hogy  $f$  nem függ  $\Phi$ -tól. Ellenkező esetben  $f$ , illetve a  $\frac{\partial f}{\partial t}$  variálandó mennyiséget tartalmaz, amely újabb tagokat hoz az egyenletbe, és ezek az időben elsőrendű deriváltat kiejtik.

A hővezetés problémájához visszatérve, az  $f(\Phi)$ -nek megfelel  $\varrho C_v T$ , és  $T$  az a függvény, amelyet variálunk. Itt  $f$  tehát nem független a variálandó függvénytől, ezért a fentiek szerint a *hővezetés (24) egyenlete nem Euler—Lagrange-egyenlet!* Ezzel szemben Gyarmati István [3] állítja, hogy (24) és más nem stacionárius termodinamikai folyamatok alapegyenletei egy variációs elv Euler—Lagrange egyenletei. Szerinte a termodinamika Lagrange-sűrűsége

$$\mathcal{L} = \varrho \dot{s} - \Psi, \quad (26)$$

ahol  $\varrho$  a tömegsűrűség,  $s$  a tömegegységre vonatkoztatott ún. fajlagos entrópia,



$\Psi$  pedig a disszipációs potenciál, amely az intenzív paraméterek gradienseivel kifejezett általános erőket tartalmazza. (26)-ot a hővezetésre specializálva, Gyarmati szerint a hővezetés Lagrange-sűrűsége

$$\mathcal{L} = \varrho C_v T \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\lambda}{2} (\text{grad } T)^2. \quad (27)$$

E Lagrange-sűrűséget alapul véve, a 2. pontban bemutatott variációs elv a  $T$  hőmérséklet variálásával (18) alapján a

$$\text{div} (\lambda \text{ grad } T) = 0 \quad (28)$$

egyenlethez vezet, ha  $\lambda$ -t a hőmérséklettől függetlennek tekintjük. (28) pedig nem a hővezetés általános egyenlete, hanem csak a stacionárius hőáramlásé! Ez nem is lehet másként, mert (27) a Prigogine-féle (22) Lagrange-sűrűségtől egy függvény idő szerint vett differenciálhányadosában különbözik csak. Ugyanis:

$$\varrho C_v T \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \varrho C_v T^2 \right). \quad (29)$$

A Lagrange-függvényhez pedig  $\frac{\partial W}{\partial t}$  időderiváltat nyugodtan hozzáadhatunk

anélkül, hogy a (18) alapegyenletek megváltoznának, ha  $W$  a variálandó mennyiségnek tetszőleges függvénye és a variálást a (10) határfeltételek figyelembevételével végezzük. A Gyarmati-féle (27) Lagrange-függvény tehát ugyanarra az egyenletre vezet, mint a stacionárius hővezetés Prigogine-féle Lagrange-függvénye. Következésképpen, nem igaz az az állítás, hogy (27)-ből a  $T$  hőmérséklet variálásával a (24)

egyenlet adódik. A sajnálatos hiba oka abban rejlik, hogy Gyarmati a  $\frac{\partial T}{\partial t}$  időderiváltat állandó paraméternek tekinti és ezt nem variálja. Ezért az ő „Euler—

Lagrange egyenletében” a  $-\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{T}}$  tag nem lép fel. A 2. pont végén rámutattunk

arra, hogy a (10) határfeltételekkel csak olyan variálás egyeztethető össze, amelynél a  $\dot{\Phi}_i$  — a hővezetésnél a  $\dot{T}$  — nem állandó, hanem azt is variálni kell. Ha a határokon a  $\delta \Phi_i$  variációk eltűnését nem követelnénk meg, akkor megengedhető lenne, hogy  $\dot{\Phi}_i$  a variált „pályákra” is ugyanaz maradjon, tehát állandó paraméter legyen. Ebben az esetben azonban a variált „pályák” a valóságostól abban különböznének, hogy azt önmagával párhuzamosan tologatnánk el. A valóságos „pálya” tehát egyáltalán nem lenne kitüntetve a variáltakhoz képest, ezért nem is várható, hogy az azt meghatározó differenciálegyenlet kiadódjék. Természetesen megengedhetők olyan variációk is, amelyek a (10) határfeltételektől függetlenek, de ekkor a hatásintegrál nem lesz szélső érték, és annak variációja nem tűnik el.

A fentiekből látszik, hogy a Hamilton-elvhez hasonló variációs elvből a hővezetés alapegyenlete nem vezethető le. E megállapítás általában is igaz a nem egyensúlyi termodinamika alapegyenleteire. Nem létezik ugyanis olyan hatásintegrál, amely szélső értéket venne fel a nem egyensúlyi termodinamikai folyamatokat leíró  $\Phi_i(\mathbf{r}, t)$  mennyiségekkel. Ezért az irreverzibilis termodinamikának sajnos nincs általános variációs elve, kivéve a korábban említett stacionárius eseteket, amelyek viszont Prigogine s mások munkáiból már régebben ismertek.



Végül még egy megjegyzés. *Gyarmati* érthetetlenül nem a hatásintegrál, hanem az

$$L = \int_V \mathcal{L} dx dy dz \quad (30)$$

Lagrange-függvény variációjának az eltűnését követeli meg. Mivel (30)-ban a helykoordináták szerint vett integrál szerepel, ezért  $L$  az időtől még határozatlan módon függhet. Így a  $\Phi_i$ -k megváltoztatásával szemben megkövetelt „szélső érték” is tetszőleges függvénye lehet az időnek. Ennélfogva egyáltalán nem várható, hogy a  $\delta L = 0$  követelmény a  $\Phi_i$  terményiségek időfüggését meghatározza. Tulajdonképpen ezzel van kapcsolatban az a szokatlan eljárás, hogy a  $\dot{\Phi}_i$ -okat *Gyarmati* állandó paraméternek tekinti.

#### IRODALOM

1. *Budó Ágoston*, Mechanika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1964.
2. *I. Prigogine*, Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes, Springfield, Illinois, USA, 1955.
3. *Gyarmati István*, Nemegyensúlyi termodinamika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1967.

# KÖNYVISMERTETÉS

**R. Mittra: Numerical and Asymptotic Techniques in Electromagnetics**

**Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1975**

A könyv a Springer kiadó „Topics in Applied Physics” sorozat harmadik köteteként jelent meg. 7 fejezetből áll, terjedelme 260 oldal.

Az 1. fejezet egyben a könyv bevezetése.

A második fejezet huzalantennák és antenna rendszerek elektromágneses terének számítását tárgyalja a momentumok módszerének alkalmazásával. Ismerteti a momentumok módszerét, foglalkozik a numerikus megoldás konvergenciájának kérdésével. Tárgyalja a log-periodikus dipol antennákra történő alkalmazását a módszernek, valamint parabolikus reflektorok táplálását antennákkal.

A 3. fejezet antennák és reflektorok jellemző módusainak meghatározásával foglalkozik. Tárgyalja a vezető test jellemző módusait, a módusok szerinti felbontást, a reflexió mátrixot, a jellemző módusok számítását, a módusok változtatását reaktív terheléssel, a dielektromos test jellemző módusait. A numerikus megoldásnál a momentumok módszerét alkalmazza. A jellemző módusoknak mind elméleti, mind számítástechnikai jelentőségük van. Jól használhatók antenna szintézis feladatoknál, a momentumok módszerénél pedig a jellemző módusok speciális tulajdonságai számítástechnikai szempontból jelentenek egyszerűsítést.

A 4. és az 5. fejezet a momentumok módszerének különböző számítástechnikai vonatkozásait vizsgálja, így a numerikus modellezést, az integrál-egyenlet mátrix egyenletté alakításának hatását a megoldásra, a mátrix megoldás konvergenciáját, stabilitását, belső rezonancia frekvencia problémáját és egyéb kérdéseket.

A 4. fejezet olyan számítástechnikai vonatkozásokkal foglalkozik, amelyek a vékony vezető modellezés numerikus megoldásának érvényességét kiterjesztik. Az 5. fejezet a momentumok módszerével kapcsolatban a numerikus analízis néhány problémáját tárgyalja. A két fejezet a momentumok módszere széles körű alkalmazásának numerikus tapasztalatait is összegezi, és az eredmények alapján a módszert illetően fontos következtetésekre jut.

A 6. fejezet célkitűzése, hogy ismertesse az elektrodinamika aszimptotikus módszereinek eredményeként a sugárzási és szóródási problémák sugár-optikai megközelítésének alapjait, jelenlegi eredményeit. Foglalkozik a Maxwell-egyenletek aszimptotikus megoldásával, szóródási problémákkal és a sugár-optika egyéb alkalmazási területével.

A 7. fejezet lineáris reflektorokkal foglalkozik. A jellemző tulajdonságok meghatározására a sugár-optika eredményeit alkalmazza. Foglalkozik a numerikus integrálás kérdésével, tárgyalja a nagy frekvenciás reflektorokat, és a gömbhullám-elmélet alkalmazását reflektorokat tápláló rendszerek tervezésénél.

A könyv áttekintést ad a numerikus és aszimptotikus módszerek — különösen a momentumok módszerének — az elektromágneses hullámjelenségek területén történő alkalmazásának legújabb eredményeiről. Nagy számú numerikus példával szemléltetve alkalmazásokat mutat be mind az antennák, mind a sugár-optika területéről. Feltételezi az elektromágneses hullámok klasszikus elméletének ismeretét. Ezért a könyv elsősorban antennák tervezésével foglalkozóknak ajánlható, de hasznos lehet azok számára is, akik az ismertetett számítástechnikai módszerekről kívánnak áttekintést és tapasztalatokat nyerni.

Bárdi István

## H II Regions and Related Topics: Lecture Notes in Physics 42

Szerkesztő: T. L. Wilson és D. Downes, 488 oldal.  
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1975.

A könyv az 1975. január 13. és 17. között az ausztriai Mittelberg (Kleinwalsertal)-ben megtartott szimpozium anyagát tartalmazza. A szimpoziumot a „Deutsche Forschungsgemeinschaft”, a „Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften” és az „Európai Fizikai Társaság” rendezte 90 résztvevővel. A szimpoziumon 50 előadás hangzott el 7 témakörben (fejezetben).

Ha egy forró, magas hőmérsékletű csillag intersztelláris hidrogén gázba van beágyazva, akkor a csillag meghatározott környezetében az ultraibolya sugárzás ionizálja a hidrogént. Ezek a tartományok a könyv tárgyát képező úgynevezett H II zónák.

A *molekula és porködök* című első fejezet 6 cikket tartalmaz, amelyek közül kiemelkedik E. E. Salpeter „A molekulák és a por kialakulása” című munkája, amelyben a többatomos csillagközi molekulák kialakulásának különféle lehetséges módjait elemzi, továbbá a porszemek kondenzálódásával foglalkozik. Számításai szerint egy csillagközi porszem három részből tevődik össze: 1., a nehezen olvadó magból, 2., a kátrányos, lassan növekvő köpenyből és 3., a gyorsan cserélődő „piszkos-jég” köpenyből.

Mivel a szénatom legkülső elektronjának ionizációs potenciálja közel esik a hidrogén ionizációs potenciáljához, a forró csillagok közül a H II zónákon kívül C II zónák is kialakulhatnak. A fejezetben több cikk (előadás) is foglalkozik a C II zónákkal mind elméleti, mind megfigyelési oldalról. A fejezet végén C. Wimmerösser összefoglalja az intersztelláris molekula vonalak kutatásának jelenlegi helyzetét és beszámol a következő csillagközi molekulavonalak észleléséről:  $\text{H}_2\text{C}_2\text{HCN}$ ,  $\text{HCOOH}$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{O}$  és  $\text{HCCCN}$ .

A *csillagok keletkezése és a H II zónák* című, sorrendben a II. fejezetből kiemelkedik S. von Hoerner „A csillagkeletkezés problémájának áttekintése” című cikke, amely elsősorban megfigyelési oldalról elemzi a csillagkeletkezés lehetséges módjait és érdekes számítást közöl a „csillagkeletkezési ráta”, különböző paraméterektől való függésének megbecslésére. A cikk külön érdeme, hogy a végén felsorolja a még nyitott problémákat (számszerint 18-at).

Érdekes még F. D. Kahn cikke a „cocoon” csillagokról, továbbá E. Krügel „A H II zónák korai állapotai” című munkája, amelyben elméletileg adja meg egy H II zóna fejlődésének menetét. Kimutatja, hogy az ionizációs fronttal együttthaladó sűrűségfront előtt a porban is halad egy külön lökéshullám.

A harmadik, *Infravörös források, maserek és kompakt H II zónák* című fejezet elején C. G. Wynn-Williams, R. E. Jannings, H. J. Habig és L. F. Smith a H II zónák infravörös és rádió-megfigyeléseit foglalja össze, majd B. F. Bruke „Molekula maserek a H II zónában” című cikkében 12 db  $\text{H}_2\text{O}$  forrás észlelési eredményeit foglalja össze. Kimutatja, hogy mind a 12 forrás kisebb 1000 csillagászati egységnél. Nagyon érdekes eredmény, hogy a W3 jelű OH forrásban sikerült kimutatni az 1720 Mhz-es rádiószinképvonal Zeemann felhasadását. A térorosság értékére a számítások  $1,3 \cdot 10^{-3}$  gauss-t adtak. A szerző szerint lehetséges, hogy az egyik forrást  $\text{CH}_3\text{OH}$  maserként lehet értelmezni; a megfigyelések alapján azonban ez még nem dönthető el egyértelműen.

Igen érdekes elképzelést közöl Burdjuza, Ruzmajkina és Varsalovics „A galaktikus H II zónákkal kapcsolatos maserek” című cikkben. Szerintük a  $\text{H}_2\text{O}$  és OH maserek a H II zóna körül kialakuló ionizációs frontban jönnek létre.

A IV. fejezet címe: *Fejlett H II zónák és OB csillagok*. Az első cikkben az O típusú csillagok főbb jellemzőit foglalja össze P. S. Conti, majd J. Meaburn néhány H II zóna megfigyelt szerkezetére ad figyelemre méltó alaposítással magyarázatot. E. Churchwell „Fejlett H II zónák” című cikkében a fejlettség foka szerint hat osztályba sorolja a H II zónákat, majd külön elemzi ezek nagyméretű, kifejlett típusát.

A *H II zónák eloszlása* című V. fejezetben rendkívül érdekes N. Z. Scoville cikke „A CO molekulák tejútrendszerbeli eloszlásáról”. Kimutatja, hogy a CO-eloszlás nagyjából megfelel a H II zónák eloszlásának, de nem felel meg az atomos H eloszlásnak. Ebből arra a következtetésre jut, hogy a hidrogén nagy része molekula formájában van jelen Tejútrendszerünkben. A fejezet további részében F. P. Israel, E. M. és G. R. Burbige és mások cikkei elsősorban a H II zónák extragalaktikus objektumokban való eloszlásával foglalkoznak.

A VI., *Galaktikus H II zónák* című fejezet különböző H II régiók morfológiájával foglalkozik. Ezek a következők: „Orion A és B” (Zuckermann), „Orion A” (S. F. Gull és A. H. M. Martin), „M 17” (D. Lemke), „DR 21” (S. Harris), „W3” (P. G. Metzger és J. E. Wink), „W 49” (T. L.



Wilson), „*W 51*” (J. Bieging), „*S Ophiuchi komplexum*” (P. Encreanz, F. Falgarone és R. Lucas) és *NGC 2023*” (J. P. Emerson, I. Furnis és R. E. Jennings).

A könyv VII. (befejező) fejezetének címe: *A galaxismagokkal kapcsolatos H II zónák*, amelyben D. Downes, E. E. Becklin és G. Neugebauer a Tejútrendszerünk centrumára vonatkozó legújabb kutatásokat foglalja össze, majd a könyvet Th. Schmidt-Kaler „*A H II zónák eloszlása a Nagy Magellán Felhőben*” című cikke zárja le.

A könyv külső alakjára rányomja a bélyegét az a tény, hogy a (különböző típusú írógépeken) legépelt cikkek sokszorosítását tartalmazza, ami önmagában véve nem nehezíti meg az olvasó dolgát, de az már igen, hogy a fejezetcímek csak a tartalomjegyzékben szerepelnek.

A könyvben a témakörben már járatos olvasó szinte kivétel nélkül megtalálhatja azokat az elméleti és megfigyelési eredményeket, amelyeket a H II zónák kutatása terén az elmúlt néhány évben elértek. Így a könyvet elsősorban asztrofizikusoknak és plazmafizikusoknak ajánlhatjuk.

Marik Miklós

#### Kapuy Ede és Török Ferenc: Atomok és molekulák kvantumelmélete

Akadémiai Kiadó 1975.

Kapuy Ede és Török Ferenc munkájú mindenképpen hézagpótló könyv, idegen nyelvű kiadást is megérdemelne. A szerzőpáros ismeri, tapasztalatból tudja, hogyan kell a fizikai lényegeket kiemelve, az egzakt matematikát felhasználva, de benne el nem merülve, megtanítani az atomok és molekulák kvantumelméletét. Ma nálunk is kiemelkedő tudós gárda törekszik egyszerű szavakkal megértetni a kvantumelmélet alapjait. Egy-egy ilyen kísérlet írásban is lerögzítést kapott. Elsődrendű fontosságúnak tartom ennek támogatását, a természettudományos gondolkodás széles tömegbázisának megeremtetését. Mindenki tudja, mégis sokan hangosan, egyesek titokban hangoztatják, hogy ezek a korszerű pedagógiai törekvések azzal a veszéllyel járhatnak, hogy felületességre nevelnek, még félig sem értett vagy egészen félreértett gondolatort alakítanak ki. Ezzel a váddal szemben nem lehet úgy védekezni, hogy az alap megeremtése, a kvantumelmélet iránti érdeklődés felkeltése után a „jobbakkor” kezébe adjuk a kvantumelmélet részletes ismertetését tárgyaló valamelyik szakkönyvet. Nem tehetjük, mert a „matematika nélküli” tárgyalás és a teljes egzaktitás között még nagyon nagy az út. Kapuy és Török könyve minden érettségizett és egy kicsit még ezen felül a matematikához konyító érdeklődőnek kezébe adható. Ha ezt áttanulmányozta, gondolatai tisztulni fognak. Jó ez a könyv annak a fizikus, kémikus, mérnök nemzedéknek is, amely már idősebb, amit tanult már részben elfelejtette, részben talán elnagyoltan hallgatta, vagy nem értette meg. Ezzel a könyvvel is korszerűbbé tehetik ismereteiket az atomok és molekulák kvantumelméletével kapcsolatban.

(T. Gy.)

M. Cardona (editor): *Light Scattering in Solids*  
Topics in Applied Physics 8. kötet 1975.

Springer Verlag. Berlin

A szilárdtestek optikai úton való vizsgálatának egyik nehézsége, hogy a fény egy része szóródást szenved. E tényező tekintetbevételének igénye fordította először a kutatók figyelmét erre a jelenségre. E kutatás később öncélúvá vált, mert kitűnt, hogy maga a fényszóródás számos, más úton nem vagy nem olyan jól nyerhető információt ad a szilárdtestek szerkezetéről, hibastruktúrájáról, a benne levő szennyezések precipitációjáról, megfelelő kezelés után diszlokációs szerkezetéről stb.

A könyv nemcsak a fotonok, hanem a fotonok szóródásának kérdésével is foglalkozik. Fő problémája a nem rugalmas fényszóródás félvezetőkben, azaz azok a jelenségek, amelyekben a foton beleütközik a félvezetőbe, termel vagy megsemmisít egy vagy több kvázi részecskét, s azután kilép belőle a belépésitől különböző energiával. A fényszóródás spektroszkópiájában a foton monokromatikus, s mérjük a szórt fotonok energia eloszlását. Új lökést kapott ez a kutatás is akkor, amikor a monokromatikus, kollimárrható, nagy energiájú lézer ideális fényforrásként megjelent. Ez különösen az alig átlátszó félvezetők fényszóródással való kutatásának fellendítéséhez adott lényeges hozzájárulást. A kötet lényeges témája az egy-két foton által létrehozott fényszóródás, beleértve a rezonans Raman szóródást. Ez a jelenség nagyon részletes információkat szolgáltat a szóródási mechanizmus és az elektron—fonon kölcsönhatással kapcsolatban. Különben a 2. fejezetben megismerhetjük a fényszóródást mint olyat, fenomenologikus leírásban, kinematikáját, kiválasztási szabályait, valamint mikroszkópikus elméletét.

A hazai elméleti és kísérleti félvezetőkutatók örömmel üdvözik a kötetet.

(T. Gy.)

B. R. Barrett (ed.): Effektív kölcsönhatások és operátorok a magfizikában

Lecture Note in Physics 40. kötet  
Springer Verlag, 1975.

Az arizonai Tucsonban 1975. júniusában nemzetközi Magfizikai Konferenciát tartottak „Effective Interactions and Operators in Nuclei” címmel.

Amint az jól ismert, a magfizikai feladatok megoldásánál egy bonyolult kvantummechanikai többtest problémát kell megoldanunk. Ehhez elengedhetetlenül szükséges, hogy ismerjük a Schrödinger egyenletben szereplő  $V$  kölcsönhatási potenciált. Feltételezzük, hogy a soktest erők nem játszanak lényeges szerepet, azaz  $V$ -t kéttest potenciálok összegének tekinthetjük:  $V = \sum V_{ij}$ . A  $V_{ij}$  két-nukleon potenciál egy olyan fenomenologikus mennyiség, amely a nukleon-nukleon szórás kísérletekből nyert adatokat és a deuteron mérhető adatait helyesen reprodukálja. A  $V_{ij}$  két-nukleon potenciált ma már viszonylag elég jól ismerjük. (Még vannak ugyan bizonyos tisztázatlan kérdések a nem-energiahéjon vett mátrix elemekkel és a rövid távon való viselkedéssel kapcsolatban, de egyre inkább úgy tűnik, hogy ezek nem befolyásolják számottevően az alacsony energián kapott eredményeket.)

A  $V$  kölcsönhatási potenciál ismeretében a Schrödinger egyenlet elvben már megoldható. A gyakorlatban azonban igen drasztikus közelítésekre, illetve modellek bevezetésére kényszerülünk. A legáltalánosabban használt modellnek a héjmodellnek a keretei közt dolgozva feltételezzük, hogy a nukleonok által együttesen létrehozott szelf-konzisztens potenciál egy-részecske állapotait a nukleonok a Pauli-elvnek megfelelően töltik be. Feltételezzük továbbá, hogy azok a nukleonok, amelyek egy mágikus számnak megfelelő zárt héjat töltenek ki egy olyan törzset képeznek, amely többé-kevésbé ismertnek tekinthető. Így csak az ún. valencia nukleonokkal, azaz a törzsen kívül helyet foglaló nukleonokkal kell foglalkoznunk. Technikai okokból a valencia nukleonok számára rendelkezésre álló egy-részecske állapotok közül csak véges számút veszünk figyelembe. Ha ezek után a valencia nukleonok kölcsönhatását két-szabad nukleon  $V_{ij}$  kölcsönhatásával azonosítanánk, akkor hibát követnénk el három különböző okból:

1. Nem vennénk figyelembe, hogy a Pauli-elv miatt a valencia nukleonok nem szóródhatnak azokba az állapotokba, amelyeket a törzs nukleonjai foglalnak el.

2. Nem vennék figyelembe, annak a lehetőségét, hogy a törzs nem abszolút inert és a valencia nukleonok hatására a törzs nukleonjai gerjesztődhetnek.

3. Végül, amint már említettük számítástechnikai okok miatt a rendelkezésre álló egy-részecske állapotok közül csupán néhány alacsonyan fekvőt vennék figyelembe. A  $V_{ij}$  szabad nukleon-nukleon potenciál helyett azonban be lehet vezetni egy olyan  $V_{ij}^{eff}$  effektív potenciált, amely definíciójánál fogva képes a fent felsorolt három hiba hatását kompenzálni.

A tucsoni konferencia kizárólag ezen effektív kölcsönhatással kapcsolatos problémákkal foglalkozott. A Springer kiadónak az a vállalkozása, hogy a Lecture Notes in Physics sorozatában megjelentette ennek a konferenciának az anyagát, igen szerencsésnek mondható, mert ez a témakör éppen az elmúlt években ment át egy tisztulási folyamaton és így a kötet egy alkalmas időpontban foglalja össze a témakörre vonatkozó ismereteket. (L. I.)

S. Haroche, J. C. Pebay—Peyroula, T. W. Hänsek and S. E. Harris (editors):

Laser Spectroscopy  
Springer-Verlag, 1975.

A könyv a Lecture Notes in Physics 43. kötete; tartalmazza a franciaországi Megève-ben 1975 júniusában tartott Second Laser Spectroscopy Conference 41 invited papers-jének anyagát és 19 határidő után beküldött abstract-et. A konferencia megmutatta a hangolható lézer források rendkívül gyors kifejlesztését, ill. minőségük megjavítását. A szerkesztők szerint negatív hatással volt a tudományos tapasztalatok szabad kifejtésére az ipari féltékenység.

A cikkek sorát a Nobel-díjas és hazánkban is jól ismert Alfred Kastler nyitja meg, röviden vázolja a lézer felfedezésének „történelem előtti” előkészítőjét, Einstein 1917-ben a világító átmenetek saját-ságaival foglalkozó, „Zur Quantentheorie der Strahlung” című, a Physikalische Zeitschriftben megjelent dolgozatát.

A Doppler-eltolódással, a lézernek a magspektroszkópiában, a lézer különböző típusaival, hangolási módjaival, a gázok rotációs—vibrációs spektroszkópiájával, a gerjesztett elektronállapotok mérésével foglalkozó új lézertechnikával, a lézerfluoriméterrel stb. foglalkozó közlemények közül nehéz valamelyiket is kiemelni. Talán a Massachusetts Institute of Technology (MIT) fizikai osztá-



lyának vezetője, Ali Javan által írt kötet záró munkája az egyik legjelentősebb. Ő a MIT-ben a Doppler-mentes rezonanciák területén végzett tanulmányokat ismerteti. Foglalkozik a szobahőmérsékletű gázban meghatározott sebességű molekulákban végbemenő ütközési kiszélesedéssel, Doppler-mentes rezonanciák esetén az adiabatikus gyors átmenetek megfigyelésével, a gyors molekuláris relaxációk mérésével, a  $\text{CO}_2$  molekulákban a  $10,6 \mu$  sávnál fellépő anomális Zeeman effektussal. Jó volna, ha a Les Houche-ban tartandó elméleti nyári iskolán, ill. a CIRP Zürichben tartandó konferenciáján magyar kutatók is részt vehetnének.

(T. Gy.)

**T. S. Huang (ed): Picture Processing and Digital Filtering  
Topics in Applied Physics 6. kötet**

Springer kiadó, 1975.

Minden tudományos és technikai kísérletben jelfeldolgozásokkal van dolgunk. A jelek között sok a többdimenziós, azaz többváltozó függvénye. Gondoljunk pl. az orvosi, sugárzási, EKG, EEG stb. görbékre, a radar és a napsugárzási térképekre, a szeizmikus adatokra, a televízióra és az űrhajókról készített fényképekre. Feldolgozásuk útja lehet: keltésük és visszajátzásuk, kvalitatív kiemelésük, az általuk hordott információ kiemelése, felismerése, transzmisszió és tárolás érdekében való kódolása stb. Felvételük történhet digitálisan vagy analóg módon. Az előbbi sokkal változatosabb, s lehetővé tette számos sokdimenziós jel feldolgozását.

A könyv részletesen bevezeti az olvasót a kétdimenziós jelek (tehát vázlatok és képek) digitális előállításának kérdésébe.

További témái a kétdimenziós átalakítások és szűrők, majd a kép felismerés és rekonstrukció talán még érdekesebb témaköre, s végül a digitális jel előállítása — speciálisan a scanner — hardware zaj problémája. — Ez a majd 300 oldalas könyvecske kutatók és mérnökök számára készült, de jó kézikönyv a digitális jelelőállítással, képkalkotással és digitális szűrőkkel foglalkozó speciális kurzusok számára.

(T. Gy.)

**Lj. Novaković: The Pseudo-spin Method in Magnetism and Ferroelectricity**

Lj. Novaković, D. Phil. Oxford: „The Pseudo-spin Method in Magnetism and Ferroelectricity” című könyve jelent meg 1975-ben a Pergamon Press kiadásában az International Series of Monographs in Natural Philosophy 77. köteteként. A könyvnek 4 fejezete van, amelyet 5 appendix egészít ki, terjedelme 202 oldal.

Az első fejezetben a  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  típusú ferroelektromos struktúrák rácsdinamikájával foglalkozik a szerző és részletesen vizsgálja a fellépő rezgési módusokat a pseudo-spin módszer segítségével. A második fejezetet a ferromágneses és ferroelektromos anyagokban lezajló fázisátalakulások tanulmányozásának szenteli. Különös figyelmet fordít az Ising modell vizsgálatára és a hidrogén-kötésű ferroelektromos anyagok tárgyalása szempontjából fontos „alagút-modell” tanulmányozására, hogy így a ferroelektromos anyagokban fellépő izotóp effektust részletesen vizsgálhassa a szelf-konzisztens molekula-tér közelítésben. A harmadik fejezetben a szerző Holstein-Primakoff és Dyson reprezentációban tanulmányozza a Heisenberg típusú ferromágneses és antiferromágneses anyagok mágneses elemi gerjesztéseit az alacsony hőmérsékletek tartományában. A negyedik fejezetben a Heisenberg modell tulajdonságait a kétidős hőmérsékletfüggő Green-függvény módszer felhasználásával tanulmányozza az alacsony hőmérsékletek határesetében és kimutatja többek között, hogy ebben az esetben a Holstein-Primakoff és Dyson-Maleev reprezentáció ekvivalens. Majd a kinetikai kölcsönhatás szerepét vizsgálja ferromágneses és ferroelektromos rendszerek esetében.

A könyv, amellet, hogy egy jó áttekintést adj a ferromágneses és ferroelektromos anyagok modern elméletének és jól megismerteti a korszerű matematikai számítási módszereket és azok alkalmazási lehetőségeit, számos új, eddig csak szakcikkekben hozzáférhető eredményt is tartalmaz, amelyek jórészt a neves szerző eredeti eredményei.

A könyvet haszonnal olvashatja mindenki, aki áttekintést kíván nyerni a ferromágneses és ferroelektromos anyagok modern elméletében és az ott alkalmazott korszerű matematikai módszereket meg akarja ismerni.

(S. T.)



Technikai szerkesztő Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1975. július 15. — Terjedelem: 7,35 (A/5) iv  
75-3269 — Szegedi Nyomda — F. v.: Vincze György

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADEMIA  
KÖNYVTÁRA

A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Apagyi Barnabás: Az <math>\alpha</math>-bomlás elmélete és alkalmazásai</i> .....	2
<i>Rajkovits Zsuzsa és Kovács István: Szemcsehatár mozgás polikristályos fémekben</i> .....	45
<i>Nagy Károly: Variációs elvek a fizikában</i> .....	69

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>R. Mittra: Numerical and Asymptotic Techniques in Electromagnetics</i> .....	77
<i>H. II. Regions and Related Topics Lecture Notes in Physics 42</i> .....	78
<i>Kapudi Ede és Török Ferenc: Atomok és molekulák kvantumelmélete</i> .....	79
<i>M. Cardona: Light Scattering in Solids</i> .....	79
<i>B. R. Borett: Effektív kölcsönhatások és operátorok a magfizikában</i> .....	80
<i>S. Haroche, J. C. Pebay—Peyroula, T. W. Hänsek and S. E. Harris: Laser Spectroscopy</i> ....	80
<i>T. S. Huang: Processing and Digital Filtering</i> .....	81
<i>Lj. Novaković: The Pseudo-spin Method in Magnetism and Ferroelectricity</i> .....	81



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

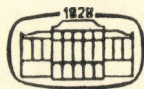
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXIV. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1976

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését, a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# **g-FAKTOROK MÉRÉSE PERTURBÁLT SZÖGELOSZLÁS MÓDSZERREL\***

VARGA LÁSZLÓ

MTA Központi Fiz. Kut. Int. Budapest

## **I. FEJEZET**

### **Bevezetés**

A jelen dolgozat magfizikai célkitűzéssel készült. Ismertetésre kerülnek azok a vizsgálatok, melyek a  $^{195}\text{Pt}$  atom magjának két gerjesztett állapotában levő mágneses momentumnak a meghatározását célozták. A gerjesztett állapotok Coulomb-gerjesztéssel lettek létrehozva, hiperfinom mágneses tér perturbálta azokat és a lebomlásból eredő  $\gamma$ -sugarak szögeloszlásából kaptuk meg a keresett magadatokat.

A dolgozat II. fejezete röviden ismerteti a  $g$ -faktorok elméleti és kísérleti meghatározásának jelenlegi helyzetét; a III. fejezetben azok az elméleti és kísérleti részletek vannak tárgyalva, melyek a IV. fejezetben ismertetendő mérés elvi alapját képezik, s amelyek az V. fejezeti kiértékelés kiindulását adják. A VI. fejezet összegzi az eredményeket.

A dolgozat magfizikai indítékai ellenére előkelő helyet ad a perturbációval szükségképpen tárgyalandó hiperfinom kölcsönhatás felvázolásának. Ez azonban szükségszerű következménye annak a komplex helyzetnek, melyben a magspektroszkópia egykori ágazata van ma, miután a szaktudományok szűk köréből általános módszerré lépett elő. Nem is olyan régen, a  $\gamma$ -sugarak szögeloszlása, ill. szöggkorrelációja főleg csak a kísérleti magfizikust érdekelte, amennyiben értékes eszközt jelentett számára bizonyos magadatok, úgy mint az impulzusmomentum, mágnesesmomentum meghatározására. Annak ellenére, hogy *Abragam* és *Pound* (1953) értékes elméleti vizsgálatai már jókorán felfedték a szöggkorrelációk és az atomi elektromos ill. mágneses terek szoros kapcsolatait, sokáig nem jelentett ez többet, mint egy alárendelt részproblémát melynek megértése fontos volt, hogy az impulzus- vagy a mágneses momentum meghatározásához szükséges korrekciókat minél gondosabban elvégezhesék. Ma azonban merőben megváltozott a helyzet. Nem csak a magfizikus igyekszik újabb és újabb régiókba a szilárdtestfizikai effektusok segítségével, de szilárdtestfizikus is egyre jobban érdeklődik a módszer, mint olyan eszköz iránt, mely sok esetben teszi lehetővé olyan kristály vagy folyadékbeli hiperfinom kölcsönhatás vizsgálatát, mely másképp nem is volna lehetséges.

\* Érkezett 1975. jan. 10.



A mi helyzetünk különösen speciális. Új módszert alkalmazva meglátjuk, hogy a más kísérletekből ismert hiperfinom mágneses tér ebben az esetben is létezik, sőt segítségével egy más összetételű ötvözetben előálló hiperfinom térerősséget is meg lehet majd határozni. Az így ismert perturbáló tér értékének a birtokában aztán a magfizika számára hasznos eredményként gerjesztett magállapotok  $g$ -faktorát kapjuk.

## II. FEJEZET

### $g$ -faktorok a magfizikában

Az atommagnak az  $I$  impulzusnyomatéka, és az ebben az állapotban mérhető  $\mu_I$  mágneses momentuma között a

$$\mu_I = g_I \cdot \mu_N \cdot I \quad (1)$$

összefüggés létesít kapcsolatot, s ez az egyenlet egyben az ún. giromágneses tényezőnek, a  $g$ -faktornak definíciós egyenlete is. Itt  $\mu_N$  az ún. magmagneton, értéke  $\mu_N = 5,05 \cdot 10^{-24}$  erg/Gauss. A mágneses momentum operátora ( $\hat{\mu}$ ) két részből tevődik össze, annak megfelelően, hogy az  $I$  impulzusmomentum is pálya ( $L$ ) és spin-összetevőkből ( $S$ ) áll:

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_{\text{pálya}} + \hat{\mu}_{\text{spin}} \quad (2)$$

és itt nyilván

$$\hat{\mu}_{\text{pálya}} = \frac{e}{2Mc} \cdot \sum_{k=1}^A g_L^{(k)} \cdot \hat{L}^{(k)} \quad (3)$$

$$\hat{\mu}_{\text{spin}} = \frac{e}{2Mc} \cdot \sum_{k=1}^A g_S^{(k)} \cdot \hat{S}^{(k)}$$

Itt  $e$  az elemi töltés,  $M$  a részecske tömege,  $c$  a fénysebesség, az összegzést pedig végre kell hajtani az  $A$  tömegszámú mag minden nukleonjára. Protonok esetében  $g_L = 1$  és  $g_S = 5,587$ ; neutronokra pedig  $g_L = 0$  és  $g_S = -3,826$ .

A magfizikában meghonosodott szokás szerint a mag mágneses momentumának a mag  $\Psi_{IM}$  hullámfüggvénnyel jellemzett  $I$  impulzusnyomatékú és  $M$  vetületű állapotában a

$$\mu = gI = \int \Psi_{II}^*(\hat{\mu})_Z \Psi_{II} dV = \langle \hat{\mu}_Z \rangle_{M=I} \quad (4)$$

értéket szokás venni. A (2), ill. (3) felírásakor feltételeztük, hogy az egész mag mágneses momentumának az operátora felírható az egyrészecske-operátorok összegéként.

Van azonban néhány tényező, mely eltérést okozhat ettől a formulától.

Az egyik ilyen az a körülmény, hogy a neutronok és protonok mágneses momentumát okozó mezonfelhő más struktúrájú lehet a magon belül, mint a szabad elemi részecske esetében. A diszperzióelmélet alapján végzett becslések azt mutatták, hogy

mintegy 7%-nyi anomális nukleon-momentum várható ebből kifolyólag (*Drell és Walecka*, 1960).

*Blin—Stoyle* (1957) szerint járulékos magmágnességére vezethetnek a magbéli mezon kicserélődési áramok is.

Nehezebb magok esetében számottevő változást okozhat *Drell és Walecka* (1960) szerint a Fermi-felület közelében levő nukleonok mágneses-momentum operátorának a relativisztikus korrekciója. Ez a pályamomentumnak mintegy 50%-os kioltására vezet középnehéz magok esetén.

*Bohr és Mottelson* (1963) szerint a sebességfüggő potenciálok, mint pl. a spin-pálya kölcsönhatás szintén mágneses momentum járulékot eredményezhet. Kéttest spinpályakölcsönhatásból kiindulva végzett becslés alapján

$$\delta\mu = \pm 0,15\tau_3 \frac{2I+1}{2I+2}$$

$$\text{adódott, ahol } I = L \pm S, \text{ és } \tau_3 = \begin{cases} 1 & \text{protonra} \\ -1 & \text{neutronra} \end{cases} \quad (5)$$

A fenti négy hatás együttesen mintegy 0,1~0,2 magmagnetont tesz ki, tehát a (2), ill. (3) alatti egyrészecske operátorral számolva ennél nagyobb pontosságú elméleti jóslatra nem számíthatunk.

## II. A. Atommagok mágneses momentumának elmélete

A mágneses momentumokra vonatkozó ismeretek nagyobb arányú fejlődése előtt főleg a páratlan tömegszámú állapotokra voltak adatok. Ezek legtöbbje eltérést mutatott a legegyszerűbb predikciótól, a „Schmidt (1937)-limittől”:

$$\mu = I \cdot \left[ g_L \pm (g_S - g_L) \frac{1}{2L+1} \right] \quad (6)$$

Az eltérések nagyok voltak (egyes esetekben az 1 magmagnetont is elérték), de nagyon érdekes, hogy a mért pontok minden esetben belül estek a  $\mu(L \pm 1/2)$  határokon.

A megoldást először *Arima és Horie* (1954), majd *Noya és mások* (1958) a héjmodell állapotok konfiguráció-keveredésében keresték, s bár sikerült egyezést kapniok a kísérletekkel, ezt csak irreálisan mély potenciál feltételezésével érhették el.

A továbbiakban *Freed és Kisslinger* (1961), majd *Kisslinger és Sorensen* (1963) a quadrupól és párkölcsönhatás figyelembevételével próbálkoztak javítani az elméleti és kísérleti eredmények egyezésén. Elméletük leginkább a  $Z \cong 50$  tartományában eredményes.

A deformált magok rotációs típusú kollektív gerjesztett állapotainak mágneses momentumát a  $Ze$  töltésű és  $A$  tömegszámú klasszikus rotátorra kapott

$$g_R = Z/A \quad (7)$$

formula adja. A kísérleti eredményeknek ettől lefelé való eltérését *Nilsson és Prior* (1961) az egyrészecske hullámfüggvények közötti párkölcsönhatást figyelembe vevő mikroszkopikus elmélettel próbálta magyarázni. A protonok között ugyanis nagyobb párerő hat, mint a neutronok között, ezért a tehetetlenségi nyomaték protonokból



eredő  $J_p$  járuléka kisebb mint a neutronokból eredő  $J_n$ . Ezért a „cranking” modell  $g_R$  kifejezése

$$g_R = J_p / (J_e + J_n) \quad (8)$$

természetesen kisebb értéket ad mint (7). *Prior* és társai (1968) konkrét számításai a kísérletekkel nagyon jól egyező eredményeket adtak a  $^{152}\text{Sm}$ — $^{192}\text{Os}$  tartományának  $2^+$  nivóira. Az általa felhasznált  $G_p = 23,5/A$  MeV  $G_n = 18/A$  MeV párerő-paramétereket az ebben a tömegszám-tartományban kapott páros-páratlan magok tömegeltéréseiből határozta meg.

*Baranger* és *Kumar* (1968) pár- és quadropul-erőket figyelembe vevő kiterjedt mikroszkopikus elmélete általában alacsonyabb  $g_R$  értékeket ad ugyanezekre az állapotokra.

*Greinernek* (1966) a fenomenologikus számításai azt veszik alapul, hogy a nagyobb párerővel rendelkező protonoknak a tömegeloszlása gömbszimmetrikusabb mint a neutronoké. Ezért kollektív modell keretei között számolt  $2^+$  állapotok mágneses sajátságaira

$$g_R = Z/A \cdot (1 - 2f) \quad (9)$$

értéket kapta, ahol  $f = \frac{N}{A} \left( \sqrt{\frac{G_n}{G_p}} - 1 \right)$ .

*Priorék* (1968)  $G_n$  és  $G_p$  adataival ez a  $g_R \approx 0,33$  gyakorlatilag konstans értéket adja.

A páratlan tömegszámú deformált magok mágneses momentumát várakozásunk szerint le kellene tudni írni egy törzsre jellemző  $g_R$  és az úgynevezett „intrinsic”  $g_K$  paraméter-párral. A kezdeti törekvések arra irányultak, hogy a mag teljes  $g$ -faktorát a páratlan részecske  $g_s$  spin-járulékához kapcsolják, de ez nem járt eredménnyel. Végül is *de Boer* és *Rogers* (1963), majd *Bochnacki* és *Ogaza* (1965 ill. 1968) arra jutottak, hogy a páratlan tömegszámú magok  $g_K$  faktora segítségével egy gyakorlatilag konstans effektív  $g_s^{\text{eff}} \approx 0,6 \cdot g_s^{\text{szabad}}$  faktort kell bevezetni. A szabad részecske  $g_s^{\text{szabad}}$  faktorának a redukcióját azzal lehet magyarázni, hogy a törzsön kívüli nukleon polarizálja a törzs nukleonjait.

A páratlan magok  $g_R$ -faktorát *Prior* és mások (1968) számították az  $^{153}\text{Eu}$ — $^{185}\text{W}$  tartomány alacsonyan fekvő gerjesztett állapotokban. A párerő-paraméterek azonosak voltak a páros-páros magoknál használt értékekkel; az effektív egyrészecske  $g_s^{\text{eff}}$  faktoroknak nincs lényeges szerepük  $g_R$ -ben; a kísérletekkel szép egyezést kaptak.

A deformálatlan páros-páros magok  $2^+$  impulzusnyomatékú állapotaiban mérhető  $g$ -faktorok értéke nem különbözik lényegesen a rotációs  $2^+$ -os állapotokétól majd az egész periodikus rendszeren át. A sikeres leírást *Lombard* és *Campi-Benet* (1970) adták az egyensúlyi állapot körüli kvadropól-vibrációk feltételezésével. A Mo, Rn, Pd, Cd és Fe izotópok  $2^+$  állapotaira jónak mondható egyezést értek el a kísérletekkel.

Kétségtelen, hogy a legigényesebb számítást *Baranger* és *Kumar* (1968) végezték. Ők az összes páros-páratlan mag  $2^+$  állapotának értelmezését összefoglalták egy ún. „egyesített modellben”, s ezt alkalmazták a deformált, deformálatlan és átmeneti tartományra.

A kvadropól és mágneses nyomatékok tömegfüggésére nagyon szépen beigazolódtott jóslásokat végeztek, az Os—Pt tartomány  $2^+$  állapotainak  $g$ -faktorát a kísér-



letekkel szép összhangban visszakapták, bár a 146–150 tömegszámok környékén vannak lényeges eltérések az elméletük és a kísérleti adatok között.

Meg kell még említeni a Greiner (1966) féle „kranking”-modell módosítását ezekre a phonon-állapotokra, mely szintén jó egyezést adott a kísérleti eredményekkel általában, de a Barangerék (1968) által jól visszaadott ugrásszerű változások értelmezésére már nem képes. Eszerint

$$g_{ph} = \frac{Z}{A} \cdot \left(1 - \frac{4}{3}f\right) \quad (10)$$

ahol  $f$  jelentése ugyanaz mint (9)-ben.

Végezetül szólni kell még a vibrációs jeleget mutató törzshöz csatolódó külső részecskét tartalmazó páratlan-páros magok gerjesztett állapotának leírásáról. E téren deShalit (1961 és 1965) fejtett ki nagyobb tevékenységet; a  $^{199}\text{Hg}$ -nek  $5/2^-$  és  $3/2^-$  állapotait sikerült leírnia az  $1/2^-$  neutronnak a törzs  $2^+$ -os phonon állapotához csatolásával, azonban a modell alkalmazhatósága nem látszik túl kiterjedtnek. Így pl. az általunk vizsgált  $^{195}\text{Pt}$  magnak Gal (1966)-tól eredő hasonló alapokon nyugvó leírása nagyon szegényesnek mondható. Úgy látszik, hogy a még nem vizsgált magasabban fekvő állapotok keverednek ezekbe az alacsonyan fekvő állapotokba ismeretlen erősséggel.

## II. B. Atommagok mágneses momentumának mérése

A gerjesztett állapotok mágneses momentumának mérésében a „mag mágneses rezonancia”-módszer (NMR) eredményessége különösen a nagyfokú pontosság tekintetében egyedülálló. A stabil és a hosszú életű instabil magok alapállapotú, hosszú felezési idejű gerjesztett állapotú mérések lecsengése után új életre látszik kelni a perturbált szögkorrelációk rezonancia jellegű lerontásának módszerében (Matthias, 1967).

A perturbált szögkorrelációs (PAC) mérések használhatóságát a gerjesztett állapot mágneses momentumának a megmérésére először Brady és Deutsch (1950), vetette fel, és ezt eredményesen alkalmazták Frauenfelder és munkatársai (1951).

A technikai nehézségek jegyében eltelt első évtized után ugrásszerű változás következett be a Mössbauer-effektus felfedezésével. Ezzel nem csak számos gerjesztett állapot  $g$ -faktorát mérték meg, de a módszer felhasználásával meghatározott hiperfinom terek sora a psec élettartamú gerjesztett állapotok mágneses momentumába is betekintést adott. A rohamos fejlődésre jellemző, hogy míg az 1963-ban tartott uppsalai PAC konferencia mintegy 40 gerjesztett állapot  $g$ -faktorát ismerte, addig 1967-ben az asilomari már több mint 200-ról tudott beszámolni. Ennek az időszaknak az eredménye volt a rádióaktív források helyett bevezetett magreakciók perturbált szögeloszlásának a felhasználása. Itt döntő szerep jutott a Coulomb-gerjesztésnek, először külső térrel perturbálva, majd a hiperfinom kölcsönhatás alkalmazásával. A technikai fejlődés széles skálájához hozzávehetjük még mind a magreakciók, mind a rádióaktív források esetén alkalmazott integrális és differenciális PAC-változatot, de a magreakciók esetén csak a bombázó nyaláb pulzálásával együtt van lehetőség a differenciális mérésre.

A hiperfinom térrel párosított Coulomb-gerjesztés egyik válfaja a nagy bombázó energiával történő gerjesztés és egyben implantálás a ferromágneses közegbe (Bor-

chers és mások, 1968); a másik (e dolgozat tárgya), az előbbihez képest alacsony bombázó energiával végzi a Coulomb-gerjesztést a ferromágneses közegbe ágyazott (ötvözött) magokon.

Más típusú magreakciók alkalmazására is került sor szép számban; ezek előnye a Coulomb-gerjesztéssel szemben az, hogy nincs annyira korlátozva a gerjesztett állapot élettartamával. Különösen kihangsúlyozott szerepe van ennek a típusnak a 20~40 MeV-es bombázó részecskékkal előállítható magasabb impulzusmomentumú izomér állapotok vizsgálatánál.

Tény az, hogy a nagyenergiájú Coulomb-gerjesztéses mérések során észlelt tranziens hiperfinom mágneses tér már addig is szolgáltatott olyan eredményeket, amelyeket más módon nem lehetett volna megkapni (pl. a  $^{70}\text{Ge}$  1040 keV-es,  $\tau=1,9$  psec élettartamú nivójának a  $g$ -faktora (Heestand és mások, 1968), mert a statikus hiperfinom tér nagyon kicsi ahhoz, hogy a rövid élettartamú nivó sugárzása észrevehető perturbációt szenvedjen, a várakozás azonban az, hogy ez a módszer sok lehetőséget rejt magában további, még rövidebb élettartamú gerjesztett állapotok momentumának a vizsgálatára.

### III. FEJEZET

#### III. A $\gamma$ -sugárzás szögeloszlása és ennek perturbációja

A bevezetésben mondottakhoz híven, e fejezetben sor kerül a  $^{195}\text{Pt}$  mag  $3/2^-$ , 211 keV-es és  $5/2^-$  240 keV-es nivója  $g$ -faktorának a méréséhez szükséges kísérleti bázis elvi tárgyalására. Ennek érdekében röviden áttekintjük a legfontosabb paramétereket konkrét kiindulásul, majd ismertetve lesz a mérési koncepció, kitűzve ezáltal e fejezet részletes programját is.

E két gerjesztett állapot jól előállítható Coulomb-gerjesztéssel (Stelson és mások, 1955), élettartamuk rendre 97 psec (Blaugrud és munkatársai, 1965,) ill. 175 psec (lásd később). Mindkét átmenet lebomló  $\gamma$ -sugárzása nagy anizotrópiával bír (McGowan és Stelson, 1959). A vasba ötvözött Pt atomok magja helyén  $\sim 1$  MGauss hiperfinom mágneses tér lép fel (pl. Buyn és mások, 1967).

Ezek az adatok a későbbiek tanúsága szerint lehetővé teszik a következő kísérlet elvégzését:

- A vizsgálandó magokat ferromágneses közegbe ágyazzuk, ahol a magok és az elektronok között hiperfinom kölcsönhatás alakul ki.
- E rendszert nagy sebességű töltött részekkel bombázzuk, melynek során egyes atommagok gerjesztődnek, többek között a kérdéses energiaszintekre is (ugyanakkor azonban vissza is lökődnek).
- A gerjesztett állapotok lebomlásakor kibocsátott sugárzások a gerjesztési körülményektől és a folyamatban szerepet játszó állapotok impulzusmomentumától függő szögeloszlást mutatnak. Ezt a szögeloszlást meghatározó további fontos tényezők még azok a külső hatások, melyek a meglökött gerjesztett magot érik annak lefékezéséig, illetve ezt követően a megállás helyén kialakuló hiperfinom kölcsönhatások a gerjesztett nivó élettartama alatt. Éppen a szögeloszlásnak a külső behatásra történő módosulása az, melyből a kérdéses nivó mágneses momentumát nyerjük.



A fejezet III. A. részében megismerjük a Coulomb-gerjesztés által előidézett sugárzás perturbálatlan szögeloszlását és annak a számunkra lényeges paraméterektől való függését, majd a III. B.-ben vázoljuk a szögeloszlások perturbációjának főbb vonásait. A III. C.-ben először a féknyom végén kialakuló hiperfinom kölcsönhatásokat tárgyaljuk, majd ezután térünk rá a lelassulás alatti effektusokra.

### III. A. A Coulomb-gerjesztés hatáskeresztmetszete és a gerjesztést követő $\gamma$ -sugárzás szögeloszlása

A problémakör alapvető műve a K. Alder és másoktól (1956) eredő cikk. Van ugyan a kifejtés formalizmusát tekintve modernebb leírás is (mint pl. Biederharn és Brussard, 1965), mi azonban a kísérleti fizikus igényeihez közelebb álló számítási részletei miatt inkább az előbbit használjuk, így most is az alapján fogunk haladni.

Lebegjen előttünk a következő fizikai kép (1. ábra):

a  $Z_1$  töltésű  $A_1$  tömegszámú bombázó lövedék elhalad a  $Z_2$  töltésű  $A_2$  tömegű mag mellett. A fellépő kölcsönhatás következtében

1. gerjesztési folyamat játszódik le,
2. a mag visszalökődik,
3. a lövedék letérül eredeti pályájáról.

E kölcsönhatás jellemző paramétere az ún. Sommerfeld-féle szám:

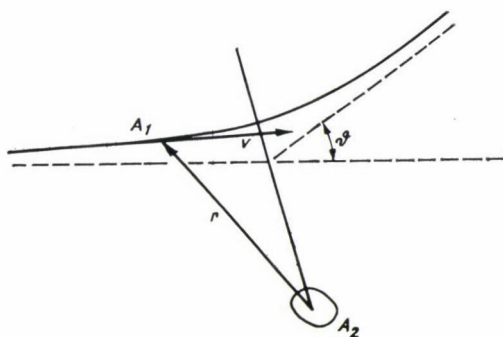
$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \quad (1)$$

ahol  $v$  a beeső részecske sebessége.

Ez a szám mértéke a kölcsönhatás effektív erősségének. Ha  $\eta \ll 1$ , akkor a Coulomb-tér csak kis torzulást idéz elő a beeső hullámban, az ütközési folyamatra a Born-közelítést lehet alkalmazni. A Coulomb-gerjesztés során előforduló sebességek esetén azonban a kölcsönhatásnak erősnek kell lenni ahhoz, hogy megóvja a lövedéket a magerők hatásától. Ilyen feltételek mellett mindig áll az  $\eta \gg 1$ , és ekkor az ütközés leírható a klasszikus pályán mozgó lövedék közelítéssel. A klasszikus tárgyalás további feltétele, hogy a mag gerjesztésére fordított  $\Delta E$  energia kicsi legyen a bombázó energiához ( $E_0$ ) képest, ezáltal ugyanis a gerjesztés hatása elhanyagolhatóan kicsi a pálya paramétereire.

A gerjesztés annak az időtől függő elektromágneses térnek a folyamánya, melyet a mag mellett elhaladó töltött részecske idéz elő. A hatáskeresztmetszet tekintetében jó eredményt ad a félklasszikus közelítés, amikor feltesszük, hogy a részecske a klasszikus pályán halad, s alkalmazzuk az időtől függő elsőrendű perturbációszámítást a mag gerjesztésére. A kölcsönhatási energia operátora elektromos és mágneses részekre bomlik, melyekkel külön-külön számolva az elektromos, ill. mágneses gerjesztési hatáskeresztmetszeteket kapjuk:

$$\sigma_{E\lambda} = \left( \frac{Z_1 e}{\hbar v} \right)^2 a^{-2\lambda+2} \cdot B(E\lambda) \cdot f_{E\lambda}(\xi) \quad (2)$$



1. ábra. Az  $r$  helyvektortól  $A_1$  tömegű bombázó lövedék közel hiperbolapályán halad el az  $A_2$  tömegű mag mellett, eközben  $\theta$  szöggel eltérül eredeti irányától.



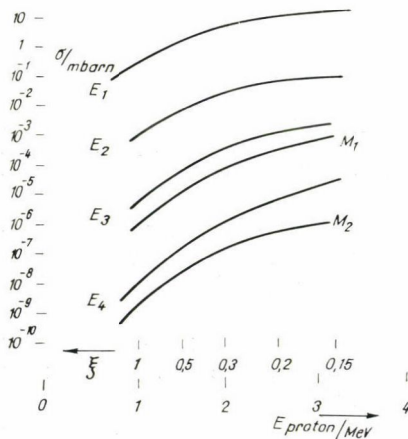
az elektromos gerjesztésre (mágneses esetben formailag ugyanez, csak  $E \rightarrow M$  és  $v \rightarrow c$  átjelöléssel). (2) a lövedék pályájának az ütközés utáni szögére kiintegrált hatás-keresztmetszetet adja. Az itt szereplő  $B(E\lambda)$  (ill.  $B(M\lambda)$ ) éppen a multipol sugárzások fejezetéből (pl. Blatt és Weisskopf, 1952) jól ismert redukált átmeneti valószínűsége az  $E\lambda(M\lambda)$  multipolrendű sugárzási átmenetnek. A multipolrendet ugyanaz a kiválasztási szabály határozza meg, mint a lebomlás esetében. (2)-ben fellépő  $f_{E\lambda}(\xi)$  komplikált módon tartalmazza  $\lambda$ -t, továbbá a klasszikus pályaintegrált és a gerjesztés körülményeire jellemző  $\xi$  dimenzió nélküli paramétert:

$$\xi = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \cdot \frac{\Delta E}{2E_0} \quad (3)$$

melynek növekvő értékeire  $f_\lambda$  exponenciálisan csökken, azonban a  $0 < \xi \leq 0,3$  tartományban  $f$  konstans, ha  $\xi \rightarrow 0$ . Centrális ütközés esetén  $2a$  távolságra közelíti meg a magot a lövedék, s ez az

$$a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{m_0 v^2}. \quad (4)$$

Kiemeljük, hogy a  $\sigma_{E\lambda}$  kifejezésnek mágneses megfelelője az első tényezőben bővül egy  $\left(\frac{v}{c}\right)^2$  faktoral, ami azzal jár, hogy a mágneses gerjesztés ugyanilyen arányban „tiltva” van az elektromoshoz képest. Az adott multipolaritású gerjesztés hatás-



2. ábra. Egy 50-es rendszámú mag 200 keV-es egyrészecske-nívójának a gerjesztési hatáskeresztmetszete a bombázó proton energiája függvényében.

keresztmetszetének a bombázó protonok energiájától való függését mutatja a 2. ábra, egy  $Z_2=50$ -es magnak  $E=200$  keV energiájú nívóra való gerjesztés esetére. A redukált átmeneti valószínűségnek a Weisskopf-féle „egyrészecske-egységet” vettük. A valóságban az a helyzet, hogy az  $E2$  átmenetek mintegy  $10 \sim 100$ -as faktoral felerősödnek, az  $E1$  átmenetek pedig tiltva vannak az egyrészecske egységhez képest, így az észlelt gerjesztések túlnyomó többsége  $E2$  típusú, még akkor is, ha az ugyanazonosnívók közötti sugárzó átmenetek  $M1$ -es keveredést mutatnak.

Azt az eltérést, amit (2) mutat a kísérletekhez képest, teljes mértékben megszünteti az, hogy a bombázó részecske  $v$  sebessége helyett a kezdeti  $v_{be}$  és az ütközés utáni  $v_{ki}$  sebességek valamiféle átlagával számolunk. Az így nyert ún. „szimmetrizált” hatás-keresztmetszetekben az

$$a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{m_0 v_{be} v_{ki}}; \quad \xi = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar} \left( \frac{1}{v_{ki}} - \frac{1}{v_{be}} \right) \quad (5)$$

kifejezést kell használnunk a korábbi  $a$  és  $\xi$  helyett; a  $\sigma_{M\lambda}$  helyett pedig annak  $\frac{v_{ki}}{v_{be}}$  faktoral szorzott értékét.

A Coulomb-gerjesztésből eredő  $\gamma$ -sugárzás szögeloszlása tulajdonképpen egy hármas-korrelációs probléma: a bombázó részecske, a szóródott részecske és a gerjesztés lebomlásából származó  $\gamma$ -sugárzás iránya közötti összefüggés. A III. A.-ban említett visszalökődéstől eltekintünk. A félklasszikus közelítés alapján számolt szögeloszlás nagy eltérést mutat a kísérletileg tapasztalttól, és a hatáskeresztmetszet esetében előnyös szimmetrizálás még tovább rontja az egyezést. Itt csakis a kvantummechanikai alapon számolt eredmények a jók. Ennek során a részecskéket Coulomb-függvények reprezentálják, a gerjesztés folyamatát a lövedék és mag közötti fotoncseréként értelmezzük. A bejövő és kimenő részecske impulzusmomentumára vonatkozó összegzés tagjaiban fellépnek a radiális mátrixelemek.

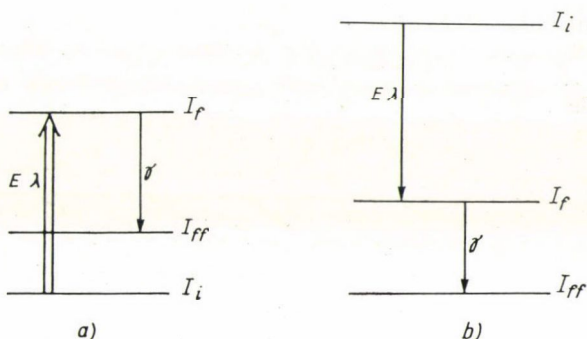
Ha polarizálatlan a targetünk, ha nem észleljük a  $\gamma$ -sugárzás polarizációját és a bombázó részecske ütközés utáni irányát, akkor ezekre a mennyiségekre való átlagolás után annak a relatív valószínűségére, hogy a beeső nyalábhoz mért  $\theta$  irányban egy  $\gamma$ -kvantum jöjjön ki a magból az  $\eta$ ,  $\xi$  paraméterekkel előidézett  $E\lambda$  típusú gerjesztés után

$$W(\theta) \propto \sum_k a_k^{E\lambda}(\eta, \xi) A_k^{(\lambda)} P_k(\cos \theta) \quad (6)$$

eloszlásfüggvényt kapjuk eredményül. Ez az  $A_k$  nem más mint a  $\gamma-\gamma$  szögkorrelációból jól ismert (pl. Biedreharn és Rose, 1953)

$$A_k^{(\lambda)} = F_k(\lambda, I_i I_f) \sum_{LL'} \delta_L \delta_{L'} F_k(LL' I_{ff} I_f) \quad (7)$$

kifejezés, ahol  $\delta_L^2$  a  $2^L$  pólusú sugárzás intenzitása az  $I_f \rightarrow I_{ff}$  átmenetben,  $F_k$ -k pedig táblázatokban megtalálható geometriai faktorok. Az  $I_i$ ,  $I_f$  és  $I_{ff}$  impulzusmomentumok sorrendjét a 3. ábra értelmezi, mind a Coulomb-gerjesztés (a), mind



3. ábra. Coulomb-gerjesztés  $\gamma$ -sugárzásának szögeloszlásához használt hipotetikus átmenetek.

pedig az analóg  $\gamma-\gamma$  átmenet (b) esetére.  $P_k$  a  $k$ -ad rendű Legendre polinom,  $k$  csak páros lehet és azon belül is csak

$$0 < k < \text{Min}(2I_f, 2\lambda, 2L)$$

ismét csak a  $\gamma-\gamma$  szögkorrelációból ismert módon. Az  $a_k^{E\lambda}$ -k az ún. részecske paraméterek; ezek tartalmazzák a radiális mátrixelemeket, melyek meghatározása  $\eta < 1$  esetén csak a pontosan kivitelezett számítással lehetséges,  $\eta > 1$  mellett azonban a



WKB közelítés teljesen kielégítő eredményt ad. Az  $\eta \rightarrow \infty$  átmenet a klasszikus számításba torkollik.  $a_2^{E2}$  és  $a_4^{E2}$  együttthatók értékei  $\eta$  és  $\xi$  paraméterek szerint rendezett táblázatokban megtalálhatók *A. Alder és mások* (1956) munkájában.  $a_4^{E2} \ll 1$ , ezért  $A_4$  erősen alárendelt szerepet játszik a mérésekben, viszont  $a_2^{E2}$  a bombázó energia növekedésével rohamosan csökken, ezáltal korlátozva annak a  $\sigma$  érdekében egyébként indokolt növelését.  $E2$ -től eltérő típusú átmenetek részecske paramétereinek a hatáskeresztmetszet diszkussziójakor mondottak miatt nincs jelentőségük.

Gyakran előfordul az, hogy az első sugárzás  $I_f$  végállapota nem kiindulása a második sugárzásnak, hanem a két állapotot egy vagy több közbülső  $\gamma$ -sugárzás emissziója köti össze. Egy nem észlelt (nem detektált) közbülső sugárzás esetén az első és harmadik sugárzás szögkorrelációját a (6)-hoz teljesen hasonló formula írja le, azzal az eltéréssel, hogy  $A_k$ -ban a nem észlelt  $L_{12}$  multipolaritású átmenetet egy Racah-együttthatóval kell figyelembe venni:

$$A_k^{(\lambda)} = F_k(\lambda, II_{f_1}) W(I_{f_1} I_{f_2} I'_{f_1} I'_{f_2}, L_{12} k) \sum_{LL'} \delta_L \delta_{L'} F_k(LL' I_{f_1} I_{f_2}) \quad (7a)$$

Itt  $I_{f_1}$  és  $I_{f_2}$  a 3. ábrán látható  $I_f$  helyett jött be, mint az ezúttal jelenlevő  $L_{12}$  átmenetet közrefogó két állapot impulzusnyomatéka.

### III. B. Atommag-sugárzások szögeloszlásának perturbációja

A fejezet előző részében leírt módon gerjesztett állapotba hozott atommag momentumai révén kölcsönhatásba kerül a környezetével. E kölcsönhatás három részre bomlik: az elektromos monopol- és kvadrupól-, továbbá a mágneses dipol-kölcsönhatásokra. Az első a mag véges térfogatában levő töltéeloszlás következménye, a második a mag elektromos kvadrupól nyomatékának kölcsönhatása a környező töltések keltette inhomogén térrel, harmadik pedig a mag mágneses dipolnyomatékának és a környező töltések keltette mágneses tér egymásra hatása. A monopol tag nem, de a másik kettő megváltoztatja az izomér állapot lebomlásából eredő  $\gamma$ -sugárzásnak szögeloszlását a perturbálatlan esethez viszonyítva.

A kifejtésben alkalmazott feltevés szerint (*Abraham és Pound*, 1953) a kölcsönhatás  $K$  Hamilton operátora az állapot létrejöttének pillanatától ( $t=0$ ) az elbomlásának  $t$  időpontjáig hat. Ezalatt a perturbáció hatására megváltozik az  $I$  impulzusnyomatékú állapotnak a kvantálási tengelyre vett különböző vetületeinek a populációja. Ez a változás a  $A(t)$  ún. evolúciós operátorral reprezentálható. Ha  $K$  statikus, akkor  $A(t)$  egyszerű exponenciális függvény:

$$A(t) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} K t \right]$$

de ha a kölcsönhatás időfüggő, akkor

$$A(t) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t K(t') dt' \right]$$

Az új populációnak megfelelő szögeloszlásfüggvény egy  $G_k(t)$  ún. perturbációs faktorban tér el a (6) alatti függvénytől:

$$W(\theta, t) \propto \sum_k a_k^{(\lambda)} A_k^{(\lambda)} G_k(t) P_k(\cos \theta) \quad (8)$$



Ez megadja tehát azt, hogy a  $t=0$ -ban keletkezett gerjesztett magok milyen relatív valószínűséggel emittálnak egy  $\gamma$ -kvantumot a  $\theta$  irányban a  $t$  időpont körüli  $\Delta t$  időintervallumban.

A gyakorlatban (8)-nak többnyire valamiféle időátlagával dolgozunk, már csak azért is, mert a berendezés paraméterei által limitált  $\Delta t$  gyakran nem elhanyagolhatóan kicsi a gerjesztett állapot élettartama mellett; sőt a mi esetünkben az állapot olyan rövid életű, hogy csak a teljes élettartamra átlagolt, az ún. (idő-) integrális szögeloszlás függvény vizsgálatáról lehet majd szó:

$$W(\theta, \infty) \propto \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} e^{-t/\tau} W(\theta, t) dt. \quad (9)$$

Természetes, hogy hasonló módon definiálható az integrális perturbációs együttható is.

A perturbációs együttható konkrét alakjának kiszámításához ismernünk kell a kölcsönhatás mikéntjét: elektromos vagy mágneses adatait és időbeli lefolyását. Az időben állandó  $H$  intenzitású, a bejövő részecske és a  $\gamma$ -kvantum iránya által definiált síkra merőleges mágneses tér esetében a perturbációs tényező olyan, hogy általa a  $\cos k\theta$ -val kifejezett (8)-beli szögeloszlásfüggvény a

$$W_{\perp}(\theta, t, H) \propto 1 + \sum_{k=2,4} b_k \cos k(\theta - \omega t) \quad (10)$$

alakot veszi fel. Itt  $b_k$  a korábbi (6)-ban található konstans faktorok mellett az új kifejtésből eredő tényezőket is tartalmazza,  $\omega$  pedig nem más, mint a  $H$  erősségű térbe helyezett mágneses dipólus precessziójának Larmor frekvenciája. Szemléletesen szólva, (10) azt fejezi ki, hogy a  $H$  intenzitású tér hatására, azok a gerjesztett magok, amelyek a keletkezésüktől számítva  $t$  idő múlva bomlanak el, egy  $\omega t$ -val elfordult, az eredetivel egyébként azonos szögeloszlásképet adnak. Mivel a magok nem mind pontosan  $t$ , hanem átlagosan  $\tau$  ideig élnek, ezért a (10)-beli differenciális szögeloszlást átlagolnunk kell. A  $0 < t < \infty$  intervallumra átlagolt ( $\equiv$  integrális) szögeloszlásfüggvény

$$W_{\perp}(\theta, \infty, H) \propto 1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k \cos k(\theta - \Delta\theta)}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}} \quad (11)$$

ahol

$$\operatorname{tg} k \Delta\theta = k\omega\tau \quad (12)$$

és

$$\omega\tau = -g\mu_N H \frac{\tau}{\hbar} \quad (13)$$

most már  $g$ -vel, a minket érdeklő giromágneses faktorról kifejezve ( $\mu_N$  a magmagneton  $= 5,05 \cdot 10^{-24}$  erg/Gauss). Vegyük észre, hogy az integrális szögeloszláskép attenuációt szenved, továbbá az elfordulása csak kis  $\Delta\theta$  esetén egyezik meg a differenciális eloszlásnak az azonos időre eső szögelfordulásával.

Ha a két detektált sugárzás között egy nem észlelt harmadik átmenet van, akkor a perturbált szögeloszláskép két állapotnak (t.i. a nem detektált sugárzás kezdeti és végállapotának) a perturbációját involválja, mely esetet Bencze és Zimányi (1966)

dolgozata tárgyalta. Ennek végformulája (statikus mágneses térrel perturbált integrális szögeloszlás) (11) képletünkkel analóg felírásban

$$W(\theta, \infty, H) \propto 1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k \cos k(\theta - \Delta\theta_{f_1} - \Delta\theta_{f_2})}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)_{f_1}^2} \cdot \sqrt{1 + (k\omega\tau)_{f_2}^2}} \quad (11a)$$

ahol (7a)-val összhangban  $f_1$  és  $f_2$  a nem észlelt átmenet kezdeti és végállapotát jelzi;  $\Delta\theta_{fi}$  pedig a (12)-ben értelmezett szögelfordulás a megfelelő indexű közbenső állapotban.

Statikus kvadrupól kölcsönhatás esetén a perturbációs faktor csak attenuációs tényező marad (nem idéz elő elfordulást); axiálszimmetrikus statikus esetben két tagra bomlik, egy időben periodikus és egy időtől független részre:

$$G_k(t) = \frac{1}{2k+1} + \sum_{n \neq n'} A \cos \left[ (E_n - E_{n'}) \frac{t}{\hbar} \right] \quad (14)$$

Itt  $A$  egy  $3_j$  szimbólum,  $E_n$ -ek pedig a perturbációs operátor energia-sajátértékei. (14)-nek „random” orientált esetre időintegrált alakja a nevezetes „hard core” értéket adja:

$$G_k(\infty)_{\text{lim}} = \frac{1}{2k+1} \quad (15)$$

Ha a perturbáló tér eloszlása nem tengely szimmetrikus, akkor a (14) kifejezés bonyolult alakot ölt, de a nemzérus határértéke (15)-höz hasonlítható alakban ezúttal is fennáll.

Az időtől függő perturbáció esetével akkor van dolgunk, amikor a mag élettartamához képest túl rövid ideig fennálló kölcsönhatások (is) vannak jelen; ezek a gyakorlatban a  $\tau_c$  korrelációs idővel (a két egymás után bekövetkező kölcsönhatás között átlagosan eltelt idő) és az ún. relaxációs konstanssal ( $\lambda_k$ ) jellemezhetők. Ezek a kölcsönhatások oda vezetnek, hogy (Abragam és Pound (1953) szerint) a (6)-beli szögeloszlási együtthatók a megfelelő perturbációs viszonyok között eltelt idővel exponenciálisan csökkennek:

$$G_k(t) = e^{-\lambda_k t}. \quad (16)$$

A  $\lambda_k$  relaxációs állandó konkrét alakja tényezőként tartalmazza a  $\tau_c$  korrelációs időt és a kölcsönhatás erősségét egyéb faktorok (mint pl. Racah-együtthatók, imp. mom. függvények) mellett. Az elemi kölcsönhatás erőssége mágneses dipól-kölcsönhatás esetében

$$I(I+1)g^2\mu_N H^2\text{-tel} \quad (17)$$

elektromos kvadrupól esetben pedig

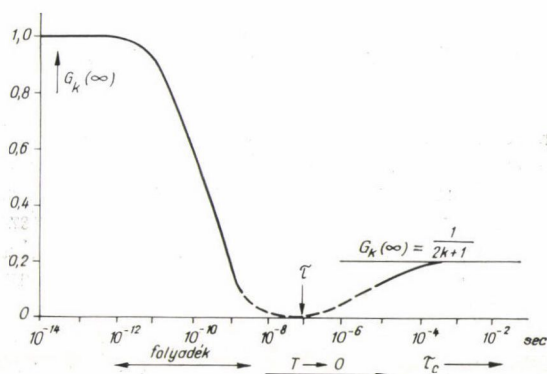
$$\left( \frac{eQ}{\hbar} \right)^2 \cdot \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}\text{-tel}$$

arányos. A gerjesztett állapot élettartamára átlagolt (integrális) attenuációs együtthatók

$$G_k(\infty) = \frac{1}{1 + \lambda_k \tau}. \quad (18)$$



Az időtől függő perturbáció a hőmozgás következtében áll elő. Elektromos esetben egyszerűen arról van szó, hogy a mag hőmozgást végző elektromosan töltött környezete változó erősségű és irányú térgradienst kelt a mag helyén. A kölcsönhatás erőssége nyilván függ a halmazállapot mellett a kémiai kötések természetétől, a korrelációs idő pedig az előbbieken túl alapvetően a hőmérséklettől. Az időfüggő mágneses perturbációra a legjobb példa a paramágneses kölcsönhatás esete. Noha a mag körüli elektronok a mag helyén vagy nem adnak teret, vagy kikompenzálják egymást, mégis, a hőmozgás révén perturbált elektron-állapotokban időszakos dekompenzáció jön létre, mely gyakorlatilag azonnal megszűnik, mielőtt a behatás véget ért.



4. ábra. Az attenuációs együtthatók kvalitatív viselkedése a korrelációs idő függvényében. Ha  $\tau_c \approx \tau$ , akkor mind a statikus, mind az időfüggő leírás csak közelítő, ezért a görbe érvényessége ebben a tartományban erősen korlátozott.

A fentieket illusztrálja a 4. ábra. Ezen a kvadrupól-kölcsönhatás integrális együtthatója látható egy  $\tau = 10^{-7}$  sec. élettartamú nivå esetére számolva (Steffen és Frauenfelder, 1964). Jól látható, hogy a laza szerkezetű folyadékokban a  $\lambda_k$  relaxációs állandó csökkenése miatt (pl. a növekvő hőmérséklet következtében)  $G_k(\infty) \rightarrow 1$ , míg a nagy  $\lambda_k$  esetében ( $T \rightarrow 0$ ) a statikus kölcsönhatás „hard-core” értéke a határérték polikristályos anyag).

### III. C. Coulomb-gerjesztéses szögkorreláció hiperfinom perturbációja

Ebben a fejezetben azt fogjuk diszkutálni, hogy mi történik a ferromágneses közegbe ágyazott „vendégmag”-gal a gerjesztődés pillanatától elbomlásáig, különös tekintettel pedig arra, hogy az elbomlásból eredő  $\gamma$ -sugárzásnak a gerjesztést végző töltött részecskék irányához viszonyított eloszlása miként viseli magán a perturbáló terek hatását.

Ennek kapcsán a következő fizikai képre gondoljunk: mikor a bombázó lövedék elhalad a kiszemelt mag mellett, nemcsak gerjeszti azt, hanem meg is löki; a vissza-



lökési energiát több-kevesebb ütközés után elveszti az atom, — megáll valahol a kristályrácsban, és az ott aktuális hiperfinom kölcsönhatásba lép a környezetével, míg végül el nem bomlik.

E folyamat tárgyalása két részben történik. Először a történelmileg korábban felmerült kérdést vizsgáljuk meg: hol áll meg a visszalökött atom, és ott mi történik vele. Másodiknak pedig a lelassulás folyamatát vesszük vizsgálat alá, annak megfelelően, hogy ennek a problematikája is újkeletűbb, s távolabb is van a megoldástól.

### III. C/1. Hiperfinom kölcsönhatás a féknyom végén

Egy ferromágneses kristályban a rácspont atomjának magja helyén fellépő hiperfinom tér felfedezését (*Khutsisvili és mások*, 1955) csak nagysokára követte az első „hiperfinom” mérés, mely a vasba ötvözött Au-magok helyén fellépő teret  $H_{\text{Au}}(\text{Fe})$  mutatta ki alacsony hőmérsékletű magorientációs módszerrel (*Samoljovék*, 1959) és csak ezután következett a vasrács Fe magjai helyén található  $H_{\text{Fe}}(\text{Fe})$  hiperfinom mágneses tér megmérése (*Hanna és társai*, 1960) a Mössbauer módszer alkalmazásával. Ez utóbbi azután megnyitotta a sort olyan mérések előtt, melyek szisztematikus vizsgálat alá vették e terek felléptének számos feltételét. Jóllehet, a jelenség részleteinek a megértése még a mai napig sem teljes, a különféle módszerekkel meghatározott ún. „belső teret” már évek óta használja az irodalom a perturbált szögkorrelációs vizsgálatok eredményeinek értelmezésére. Ezek között is első volt *L. Keszthelyi és kollégáinak* (1964) dolgozata az Au  $g$ -faktorának a meghatározásánál a  $H_{\text{Au}}(\text{Fe})$  felhasználásával. A kialakult nagy érdeklődés oka abban rejlik, hogy az előforduló nagy terek segítségével még a psec tartományba eső  $\tau$  esetén is mérhető  $\omega\tau$  adódik (13)-ból. Itt most röviden áttekintjük az irodalom mai álláspontját e terek eredetéről, majd megvizsgáljuk, hogy indokolt-e arra számítani, hogy azok a mi kísérleteinkben is fel fognak lépni.

Nos, mint ismeretes, a ferromágneses kristályrács egy rácspontjában elhelyezett nem ferromágneses anyag atomjának a magja helyén számos okból kifolyólag lép fel mágneses tér. Nyilván számot tudunk adni a rákapcsolt külső térről, a Lorentz és lemágnesező terekről, melyek azon felül, hogy ismertek (ezért korrekcióba vehető) még kicsik is az itt aktuális hiperfinom térhez képest. A ferromágneses környezet  $3d$  héjából eredő közvetlen dipóltér szintén kicsi, de ezt sem kell feltétlen elhanyagolni. A betöltetlen héjak elektronjainak pálya-impulzusmomentumai „befagynak” kristályszerkezeti okok miatt (*Kittel*, 1966), az elektronok dipólus járulécai pedig eltűnnek, ha köbös a kristálszimmetria (mi pedig csakis ilyenekkel fogunk foglalkozni a továbbiakban). E másodlagos erősségű járulékok mellett két fő tényező viszi a döntő szerepet: a vezetési elektronpolarizáció (CEP = conduction electron polarisation) és a core-polarizáció (CP). Alapjaiban mindkettő a ferromágneses környezet (matrix) telítetlen  $3d$  héjában található kompenzálatlan momentummal való (az  $s$  elektronok által közvetített) kölcsönhatásból ered. Már *Fermi* (1930) majd *Fermi és Segrè* (1933) is rámutattak arra, hogy az atomi hiperfinom terek eredetét meg lehetne érteni a mag mágneses momentumának és az elektronspínnek és pályamomentumuk kölcsönhatása alapján. S valóban, az  $L$ ,  $S$  és  $I$  elektron

pálya- és spin, továbbá magspin impulzusmomentum operátorokkal felírt (Watson, Freeman, 1961)

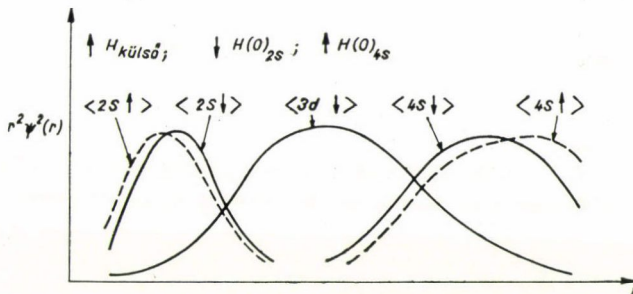
$$H = -g g_I \mu_0 \mu_N \left\{ \frac{8\pi}{3} \delta(r) I \cdot S + \frac{I(L-S)}{r^3} - 3 \frac{(Ir)(Sr)}{r^5} \right\} \quad (19)$$

Hamilton operátornak csak az első, a delta függvényt tartalmazó tagja (az ún. Fermi-féle kontakt tag) ad járulékot  $s$  elektronok esetében, a másik két tag a dipól kölcsönhatást képviseli, mely a kristályszimmetriák miatt gyakorlatilag eltűnik. Az első tagból eredő energijárulék értelmezhető úgy, mint az  $I$  impulzusmomentumú és  $g$  gironmágneses faktorú mag energiája egy  $H$  hiperfinom mágneses térben, mely az  $S$  elektronoknak a mag helyén el nem tűnő sűrűségéből ered:

$$H_{hf} = \frac{8\pi}{3} g \mu_0 S |\Psi(0)|^2. \quad (20)$$

Ezzel a kontakt taggal szokás értelmezni a páratlan  $s$  elektront tartalmazó szabad atomok spektrumának hiperfinom szerkezetét, a molekulasugaras méréseket és újabban a fémekbeli Knight eltolódást is.

Ez a kontakt tag működésbe tud lépni azonban akkor is, ha az  $s$  elektronok párban vannak ugyan, de a radiális hullámfüggvényeik nem azonosak. És tényleg,



5. ábra. A  $\uparrow$  irányú külső tér  $\downarrow$  polarizálja a  $3d$  héjat; ez vonzást jelent az  $s\downarrow$  és tasztítást az  $s\uparrow$  elektronokra, így az  $r=0$  helyen a törzs  $2s$  elektronjai  $\downarrow$  irányuló, a  $4s$  vezetési elektronok  $\uparrow$  irányuló hiperfinom teret keltenek.

amint azt Watson és Freeman (1961) spinpolarizált Hartree—Fock-számítással kimutatták, egy lezáratlan  $d$  héjban fellépő kompenzálatlan momentum ( $\mu_0$ ) kicserélődési kölcsönhatása egy zárt  $s$  héjbeli elektronnal más, ha ez utóbbi spinjével  $\uparrow$  mint ha  $\downarrow$  áll  $\mu_0$ -hoz képest. Ennek a következménye az, hogy a két  $s$  elektronnak a radiális hullámfüggvénye kissé eltérő lesz, azért a mag helyén nem adódik teljes kioltás; az ebből adódó különbözeti spinsűrűség a Fermi kontakt kölcsönhatást eredményezi „párosított”  $s$  elektronhéj esetén is:

$$H_{hf} = \frac{8\pi}{3} g \mu_0 S \sum_{s \text{ héjak}} [\varrho_{\uparrow}(0) - \varrho_{\downarrow}(0)] \quad (21)$$

Itt  $\varrho(0) = |\Psi(0)|^2$ . Illusztrációként tekintsük meg Shirley (1966) idevágó ábráját (5. ábra). A külső  $H \uparrow$  tér polarizálja a  $3d$  héjat lefelé:  $\downarrow$ . Ez némi vonzást jelent a



$2s\uparrow$  és  $4s\uparrow$  elektronokra, ugyanakkor taszítást a  $2s\downarrow$ , ill.  $4s\downarrow$ -ra. Egyben azt is mutatja, hogy ez a tér ellenkező irányú mint a rákapcsolt külső tér. A vizsgálatok szerint, a tiszta vas  $3d$  héjában  $\mu=2.22$ , a kobaltéban  $1.71$ , a nikkelében  $0.62$  Bohr magneton értékű mágneses momentum található. Egy nem ferromágneses elem atomjainak a telítetlen  $d$  héjában is jelenhet meg kompenzálatlan momentum (ha azt az atomot egy ferromágneses kristály rácsponthába helyezzük) azáltal, hogy a környező momentumok és a szennyezés lezáratlan  $d$  héjában levő elektronok között kicserélődési kölcsönhatás lép fel. Ez a momentum a fentiekhez hasonló módon polarizálja a nem ferromágneses szennyező atomban a „core”  $s$  elektronjait, s létrehozza a magja helyén a hiperfinom mágneses térnek a CP-vel jelölt részét. *Watsonék* (1961) számítása alapján meghatározható, hogy a  $d$  héj egyetlen kompenzálatlan momentum mekkora hiperfinom teret ( $H_d$ ) kelt; ezt felhasználva, és a szennyezésen levő momentum ( $2\langle S_z \rangle$ ) ismeretében (*Shirley és mások*, 1968) mondhatjuk, hogy

$$H_{CP} = 2 < S_z > H_d. \quad (22)$$

Gyakran találkozunk azonban olyan esetekkel, amikor a szennyező atomon „nincs momentum”, mégis fellép a nagy hiperfinom tér. *Watson és Freeman* (1967) spinpolarizált sávszámításai szerint ilyen esetekben az történik, hogy a ferromágneses rács momentumai polarizálják a vezetési sávban levő  $s$  elektronokat. *Daniel és Friedel* (1963) eredményei viszont megmutatták, hogy a polarizált  $s$ -elektronok szóródása egy szabad atomon hiperfinom teret eredményez annak magján.

*Shirley és mások* (1968) abból kiindulva, hogy a vezetési sáv  $s$ -hullámú állapotai a szennyezés közelében nagyon hasonlóak az atomi hullámfüggvényekhez, arányba állították a mért hiperfinom tereket a szabad atom  $n$ -edik (külső)  $s$  héjában levő egyetlen elektron által kontakt kölcsönhatással kelthető térrel ( $H_S$ ), és a mért eredmények szisztematikáját vizsgálva azt találták, hogy az arányossági tényező nagyon egyszerű feltevésekkel visszavezethető az alapmátrix atomjain levő momentumra ( $\mu_0$ -ra):

$$H_{CEP} = 0,027\mu_0 H_S. \quad (23)$$

Mármost, általános esetben azt mondhatjuk, hogy a mag által észlelt hiperfinom mágneses tér

$$H_{hf} = H_{CEP} + H_{CP} = 0,027\mu_0 H_S + 2 < S_z > H_d \quad (24)$$

Az itt szükséges  $H_S$  konkrét értékének meghatározására számításokat végzett *Shirley és Westenbarger* (1965),  $H_d$ -re pedig *Freeman és mások* (1966),  $\mu_0$ -ra,  $\langle S_z \rangle$ -re pedig mérési adatok vannak.

Meg kell jegyezni, hogy (24) csak fő vonalaiban mutat összhangot a kísérleti adatok hosszú sorával, de ez nem is meglepő, tekintettel a (még közelítő volta ellenére is) rendkívül komplikált és hosszadalmas numerikus számításokra. A ma ismert belső tér értékek száma jócskán meghaladja a 100-at, még akkor is, ha csak az  $Y$  alapmátrix (ez főleg Fe, Co, Ni, de lehet Mn, Gd.) és az  $X$  szennyező atomok lehetséges kombinációja esetén előálló  $H_X(Y)$  hiperfinom tereket vesszük számításba, az összetételtől, hőmérséklettől való függésről nem is beszélve. E mérések zömét spin-echo (SE) és perturbált szögkorreláció (PAC) módszerrel végezték, de nagyon sok esetben bizonyult eredményesnek a mag mágneses rezonancia (NMR) és a Mössbauer (M) módszer; az utóbbi időben egyre gyakrabban szerepel e téren a mélyhűtéses magpolarizáció módszere is.



A hatvanas évek első felében még nagyon sok gondot okozott a kutatóknak az, hogy a gerjesztett állapot létrejöttének körülményei ( $\beta$  bomlás,  $K$  befogás) nem okoznak-e zavarokat a hiperfinom kölcsönhatás fennállásához szükséges elektronstruktúrában („recovery” vagy „after”-effektus, „shake-off”-effektus (Steffen és mások, 1964), mely az M vagy PAC eredményeket kétségesse teheti.

Alapvetően fontos volt ebben a kérdésben Metzger (1961) mérése. Ő az  $^{56}\text{Fe}$  első gerjesztett nivójának  $g$ -faktorát mérte meg. Ez a nivó  $\tau=11$  psec-ig él, és a  $^{60}\text{Co}$   $\beta$ -bomlását követő 847 keV-es  $\gamma$ -sugarak rezonancia szórásával gerjesztette. A  $0-2-0$  impulzusmomentum szekvenciájú átmenet nagy anizotrópiát mutató szöggkorrelációját az akkor már több forrásból ismert  $H_{\text{Fe}}(\text{Fe}) = -337$  kGauss (pl. Hanna és mások, 1960) belső térrel perturbálta, s az  $\omega\tau$ -t meghatározta. Mérésének azért van nagy jelentősége, mert itt a gerjesztési folyamat során nemcsak hogy nem lökődik ki az atom az eredeti kristálytani helyéről, de még az elektronszerkezet is teljesen érintetlen marad.

Az Appel és Mayer (1963) által  $^{56}\text{Co}$  forrásból származó  $^{56}\text{Fe}$   $4^+ - 2^+ - 0$  kaszkádon elvégzett PAC mérés eredményének jó egyezése Metzger (1961) eredményével azt mutatja, hogy még az anyaelem  $\beta$ -bomlásával együttjáró, a leányelemet a rácspont elhagyására kényszerítő nagy visszalökési energia sem szünteti meg a hiperfinom mágneses teret, vagy legalábbis a meglökött mag olyan helyen áll meg, hogy ott a magnívó 11 psec-nyi élettartamához képest észrevehetően rövid idő alatt felépül a hiperfinom mágneses tér (a sajnos nagy mérési hibán belül). Hasonló következtetés vonható le a  $^{106}\text{Pd}$  mag 512 keV-es ugyancsak rövid ( $\tau=18$  psec-es) élettartamú  $2^+$  állapotára a hiperfinom térben kapott nagy pontosságú  $\omega\tau$  (Murray és mások, 1967), és a külső térben elvégzett PAC mérések (Körner, Ortabasi, 1965) eredményéből, melyek az NMR módszerrel meghatározott  $H_{\text{Pd}}(\text{Fe})$  értékkel (Kontani, Itok, 1967) azonos teret adják. Ide kapcsolódik Kalish és Kossler mérése, mely ugyancsak az  $^{56}\text{Fe}$  845 keV-es nivójának a hiperfinom perturbációjával foglalkozik, de itt a gerjesztést 7,8 MeV-es protonokkal bombázva állították elő. A gerjesztés során nyert visszalökési energia maximuma

$$E_{\text{rec, max}} = E_0 \frac{4A_1 A_2}{(A_1 + A_2)^2} \quad (25)$$

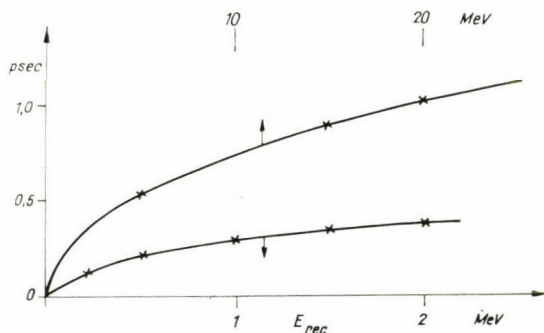
szerint ( $A_1$  a bombázó,  $A_2$  a bombázott részecske tömegszáma) 540 keV, s ez azt jelenti, hogy a gerjesztett magoknak több mint 99%-a megkapja azt az  $E_{\text{rec}} \cong 100$  eV visszalökési energiát, mely szükséges ahhoz, hogy az atom 100%-os valószínűséggel kilöködjék az eredeti helyéről (Erginsoy és mások, 1964). Bár ezúttal is meglehetősen nagy statisztikus hibával (30%), de reprodukálódott Metzger (1961)  $\omega\tau$ -ja. Tehát beiga-zolódott Erginsoyék (1964) elméleti jóslata, miszerint a gyors vasatomok teljes energiacsereelő ütközéssel megállhatnak substitutionális rácspozícióban. Ezt az állítást még jobban megerősítette E. Ritter és társainak (1967) mérése, kik ugyancsak Coulomb-gerjesztéssel állították elő az  $^{57}\text{Fe}$  100 nsec-es élettartamú gerjesztett állapotát, s azon Mössbauer-effektust mértek. Eredményük nemcsak arra mutat, hogy maradéktalanul fellép a statikus (azaz a visszalökési energiával nem motivált) mérések hiperfinom tere, hanem a Mössbauer-effektus határfoka is azt adta, hogy az elbomló magok mind ugyanolyan környezetben vannak, mint amilyenben a visszalökésmentes esetben lenni szoktak. Hasonlóan nagyon fontos Schmidt és társainak (1967) mérése, mely szerint a  $\text{CaF}_2$  target protonbombázásával gerjesztett  $^{19}\text{F}$  magok  $5/2^+$  állapotának ( $\tau=126$  nsec) lebomlása arra mutat, hogy a bombázás okozta sugárkárosodás

nem idézett elő vakanciákat, azon kívül pedig a  $^{19}\text{F}$  magok pályájának a vége felétlenül köbös szimmetriájú helyen kell legyen, hogy Sugimoto (1964) méréséből ismert  $Q=0,11$  barn kvadrupól nyomatékú állapot sugárzásának a szögeloszlása ne attenuálódjék. Ugyanez következik Körnerék (1964) differenciális perturbált szögeloszlás méréséből, mikoris megkapták az attenuálatlan Larmor precessziót, ami kizárja a sugárkárosodást a kvadrupól kölcsönhatást, ezáltal bizonyítva a köbös szimmetriát a féknyom végén, az  $^{57}\text{Fe}$  10 nsec-es élettartamú 137 keV-es nívója esetében.

A III. C/1. alatt elmondottakat összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a köbös szimmetriát mutató ferromágneses kristály rácspontjában elhelyezett atom magja hiperfinom teret érez az alrács atomjain levő lokalizált momentumokból kiinduló és az  $s$  elektronok által létesített kontakt-kölcsönhatás révén. Ez a hiperfinom tér rendkívül gyorsan (fémekben  $t \leq 1$  psec) felépül; a gerjesztést követően lefékeződött atom főleg substitucionális helyen áll meg, környezetében minimális a vakanciák száma. A belőtt bombázó részek messze elhagyják a gerjesztés-lefékeződés színterét, emiatt nem okoznak összetételbeli változást e fontos térrészben.

### III. C/2. Perturbáció a lefékeződés alatt

Az a  $t < 1$  psec időtartam, mely alatt a gerjesztés pillanatában meglökött részecske lefékeződik, bővelkedik érdekességekben. A 6. ábrán láthatjuk a Linhard (1969)



6. ábra. Pt atomok vasban való lefékeződéséhez szükséges idő a visszalökési energia függvényében

elmélet alapján számolt görbét, mely a  $^{196}\text{Pt}$  atomoknak vasban történő lefékeződéséhez szükséges időnek az atom visszalökési energiájától való függését mutatja. Az irodalomban „IMPACT”-mérések néven ismert kísérletek során  $\approx 35$  MeV energiájú  $^{16}\text{O}^{5+}$  ionokkal bombázzák a néhány  $\mu\text{gramm}/\text{cm}^2$  vastagságú, ferromágneses anyagra párolt céltárgyat [Murnick (1967), Borchers és mások (1968)]. A gerjesztett mag lebomlásából eredő  $\gamma$ -sugárzással koincidenciában detektálták a  $180^\circ$  körül visszaszórt bombázó részeket; az így kiválasztott gerjesztési folyamatokban még  $A \geq 200$  esetén is  $\approx 10$  MeV energiájú meglökési energiát nyert az atom. Ez az energia bőségesen elegendő arra, hogy eredeti helyéről „átplántálódjék” a telítésig mágnesezett ferromágneses hátlapba („backingbe”).



A visszalökéskor nyert energia elég nagy ahhoz is, hogy az atom akár 5—6-szorosan is ionizálódjék (*Grozdins és mások*, 1967). A fékeződés során lépten-nyomon töltést vesz fel, újra veszt; ezek a mozzanatok  $10^{-16}$  sec-es karakterisztikus idővel mennek végbe [ $10^{-8}$  cm/ $10^8$  cmsec $^{-1}$ =az átlagos atomtávolság/átlagos visszalökési sebesség], olyan gyorsan és nagy számban, hogy a magra gyakorolt hatások kiátlagolódnak nullává annak ellenére, hogy egy kompenzálatlan elektron spinje igen nagy teret kelthet a mag helyén. Ezt igazolja az is, hogy gázba vagy vákuumba kilőtt atomok sugárzásának a szögeloszlása nagy paramágneses attenuációt jelzett (*Goldring*, 1966).

Telítésig mágnesezett vas, kobalt vagy nikkelfóliába löve a gerjesztett magokat megkapták a várt hiperfinom mágneses teret, ez perturbálta a szögeloszlást és számos g-faktor értéket meg lehetett határozni. Feltűnt azonban, hogy néhány statikus módon megmért  $\omega\tau$  eltért az IMPACT  $\omega\tau$ -tól (*Borchers és mások*, 1968). Az eltérések szisztematikus vizsgálata azt mutatta, hogy az értelmezhető egy olyan mágneses térrel, mely nagyon intenzív, de rövid ideig tart (célszerű nevén tranziens térrel).

Ez a tér

- a) mindig pozitív (függetlenül attól, hogy a statikus hiperfinom tér pozitív, vagy negatív-e), vagyis előjele mindig megegyezik az alkalmazott külső tér irányával,
- b) elsősorban a mozgó ionra hat,
- c) e térnek a szögeloszlás-kép elfordulására gyakorolt idő-integrált hatása („precesszióimpulzus”) arányos a rendszámmal,
- d) az arányossági tényező pedig arányosságot mutat a ferromágneses alaprács, atomjainak mágneses momentumával.

A jelenség elméleti magyarázatára két javaslat is született: az egyik *Borcherséktől* (1968), a másik *Linhardtól* (1969). *Borchersék* (1968) szerint az erősen ionizált állapotban belőtt atomok a ferromágneses rács polarizált elektronjaiból valószínűleg többnyire spin-flip nélkül felvesznek néhányat; ezek aztán beépülve az elektronhéjba, Fermi-féle kontakt kölcsönhatás révén teret keltenek a mag helyén. Azt, hogy a tranziens polarizáció milyen gyorsan hal el, és a statikus hiperfinom tér milyen gyorsan épül fel, nem lehet tudni, de egyszerű, a határozatlansági relációra épülő érvelés alapján feltételezik, hogy ez a relaxációs idő pár psec-nél nem lehet nagyobb (a vasbeli kb. 20 kGauss átlagos tér jelenlétében). Véleményük szerint a tranziens tér fellépése a pálya végső szakaszán a legindokoltabb, amikor a mozgó ion már annyira lelassult, hogy sebessége megegyezik a rács polarizált  $d$  elektronjainak Bohr sebességével ( $v'$ ): ekkor van maximális valószínűsége a polarizált elektron felvételével történő rekombinációnak.

*Linhard* (1969) szerint nincs jelentősége a meglökött atom ionizált voltának, legfontosabb az, hogy az atom mozog a telítésig mágnesezett kristály terében: ezáltal az álló atomhoz képest sokkal nagyobb számú elektronszóródás játszódik le rajta. Ez az elektronszórás felsokszorozza a kristályban található átlagos teret ( $H$ ), optimális esetben akár 300-szorosára is. A sokszorozódás ( $\chi$ ) arányos a meglökött



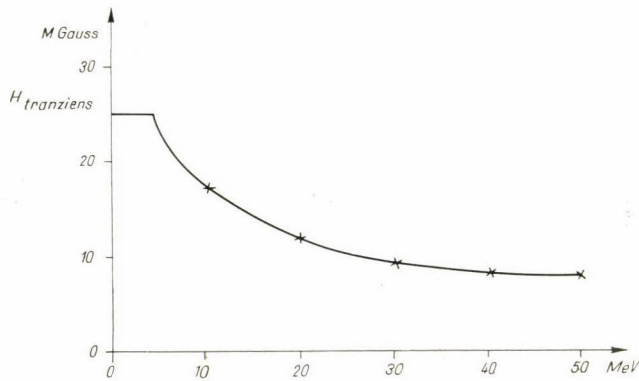
atom  $Z_2$  rendszámával és fordítottan arányos az atom — polarizált elektron relatív sebességével:

$$\chi = \frac{2}{3} 2\pi \frac{Z_2 e^2}{\hbar} \left\langle \frac{1}{v_r} \right\rangle$$

és itt

$$\left\langle \frac{1}{v_r} \right\rangle \simeq \begin{cases} 1/v & \dots v > v' \\ 1/v' & \dots v < v' \end{cases} \quad (26)$$

A (26)-tal kapható  $H_{\text{tranzien}} = \chi H$  látható egy Pt atom pillanatnyi sebessége függvényében a 7. ábrán. Ennek az ionpálya menti integrálja adja azt az összehasonlítást, melyet a mag érez a lelassulás alatt.



7. ábra. A Pt atomok magja helyén levő hiperfinom mágneses térerősség a féknyom megfelelő energiájú pontjaiban.

A két elmélet alapvetően különbözik abban, hogy az első szerint döntő szerepe van a kezdeti ionizációnak, anélkül nincs tranziens tér; a második szerint minden visszalökési energiánál fellép, s bár a visszalökési energiával együtt monoton változik, mégis, legfontosabb szerepe a féknyom alacsonyenergiájú végének van, amennyiben a legerősebb felsokszorozódás ekkor következik be, s itt időz legtovább a lelassuló részecske.

A kísérleti vizsgálat éppen a fenti kérdés tekintetében nem hozott döntést. *Borchersék* (1968) megmutatták ugyan, hogy az alacsony energiájú szakaszban lényegesen változik a tranziens tér, de a nagy statisztikus hibák miatt azt már nem lehet eldönteni, hogy ez a változás vajon a pálya ionizált szakaszára esik-e még. Ugyanezt a kérdést vizsgálták *Kalishék* (1968) is, úgy látszik *Borchersékkel* (1968) azonos konklúzióval, de ugyanerről a mérésről ellenkező értelmű nyilatkozat is látott napvilágot (*Murnick és társai*, 1968).

A  $^{195}\text{Pt}$  mag itt leírt vizsgálata során a maximális visszalökési energia mintegy 50 keV. Hogy ilyen esetben milyen mértékű tranziens tér várható, az nyitott kérdés. Nem kétséges, hogy sem a töltéscserélő folyamatoknak nem juthat szerep energetikai okokból kifolyólag, sem a Linhard-féle térfelsokszorozódási kép nem ígér túl nagy precesszióimpulzust, mivel a 7. ábra  $H(E)$  görbéjének csak a közvetlen elején levő

területrésszel arányos effektusról lehet szó, ami csak kis töredéke a teljes görbe alatti (összesen kb. 16 MGausspsec-et kitevő) területnek.

Közvetlen közelmúltban megjelent két dolgozat végül megoldotta a kérdést. Először *Varga és Koicki* (1969) vizsgálták a  $^{212}\text{Bi}$  alapállapotából a  $^{208}\text{Tl}$  mag első (40 keV-es) gerjesztett állapotára vezető 6,050 MeV-es  $\alpha$ -részek és az ezeket követő 40 keV-es  $\gamma$ -sugarak perturbált szögkorrelációját. Ez a gerjesztett állapot  $\tau = 9,3 \pm 1,1$  psec élettartamú (*Sevier*, 1965). A 6 MeV-es  $\alpha$ -részek 116 keV energiával lökik meg a leánymagot. A vas felületére gyűjtött  $^{212}\text{Bi}$  atomok merőlegesen kifelé irányuló  $\alpha$ -részek esetén kb.  $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  mélyre lökődnek a vasba. Az  $\alpha$ -részekkel koincidenciában detektált 40 keV-es  $\gamma$ -sugarak szögkorrelációja perturbációt szenvedhet a lefékeződés alatt fellépő tranziens tér hatására, majd a megállást követően kialakuló hiperfinom mágneses tér által. Az előző kb. 16 MGausspsec-re tehető (*Borchersék*, 1968) az utóbbi  $-360 \text{ kG}$  a *Shirley-féle* (*Shirley és mások*, 1968) szisztematika alapján. Attól függően, hogy a tranziens tér milyen erősséggel lép fel, az  $\omega\tau$ -nak

$$-0,073 < \omega\tau < +0,019 \text{ radián}$$

korlátok közé kell esnie. A mérés eredménye  $\omega\tau = +0,020 \pm 0,023 \text{ rad}$  lett, ami azt valószínűsíti, hogy a tranziens tér nem lép fel.

A másik idevágó dolgozat még többet mond, *J. A. Cameron és kollégái* (1970) 5–10 MeV energiájú  $\alpha$ -részekkel bombázták a vasba ágyazott  $^{103}\text{Rh}$  magokat. A kapott  $\omega\tau$  precesszió mutatta a bombázó energia függvényében konstans, az irodalommal összhangban álló (*Dreyfus és mások*, 1967) hiperfinom teret, majd 8 MeV  $\alpha$ -energia környékén megjelent a várt értékű tranziens tér. Ez az  $E_\alpha = 8 \text{ MeV}$  éppen akkora visszalökési energia felléptével jár, amekkorával az  $^{103}\text{Rh}$  atomok zömmel megkapják a vas  $d$ -elektronjainak a Bohr-féle sebességét. Ennél nagyobb visszalökési (ill. bombázó) energiákra már nem mutat változást a tranziens tér. A jelek szerint tehát *Borchersék* (1968) képe áll közelebb a valósághoz. Ami pedig a számunkra fontos a mi Pt magjaink csak 50–60 MeV-es protonenergia esetén szenvedhetnének a vas  $d$ -elektronjainak Bohr-sebességével ekvivalens energiájú visszalökődést.

Összegezve a perturbációval kapcsolatos megállapításainkat, a várakozásunk az, hogy a szögeloszlás perturbációját csak hiperfinom eredetű statikus mágneses tér fogja okozni, ha a platina atomok köbös szerkezetet mutató kristályrácsban helyezkednek el. A gerjesztéssel együttjáró visszalökődés nem fog a tranziens tér felléptéhez vezetni, a lefékeződés végén nagy valószínűséggel rácsponthoz áll meg a gerjesztett magú atom.

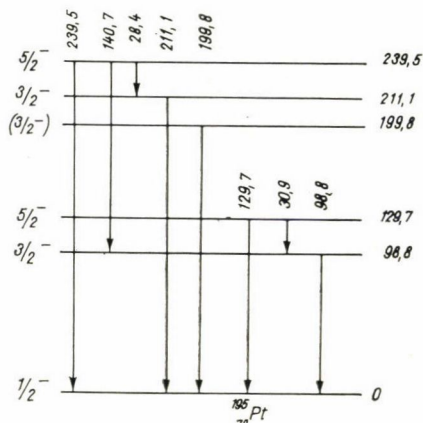
#### IV. FEJEZET

##### A mérés

Ebben a fejezetben ismertetésre kerülnek mindazok a mérések, melyeket azért végeztem el, hogy a  $^{195}\text{Pt}_{117}$  mag 211,2 keV és 239,8 keV energiájú állapotainak a  $g$ -faktorát meghatározzam. A mag nívósémáját a 8. ábra mutatja be *Shöneberg és munkatársaitól* (1967) eredő legújabb eredmények alapján. A kérdéses állapotokat úgy állítottam elő, hogy a platinára nézve természetes izotóp-összetételű céltárgy atommagjait 2,5 MeV energiájú protonnyalábbal bombázva Coulomb-gerjesztettem.



Ez a bombázó energia jó kompromisszumnak bizonyult a már eléggé nagy hozam, de a még nem zavaróan kicsire lecsökkent (a szögeloszlást attenuáló)  $a_k$  részecskeparaméterek (III. 6.) között, ezenkívül a ferromágneses alaprács gerjesztése sem adott még zavaróan nagy háttérrel. A 8. ábra meggyőz bennünket arról, hogy a keletkezett  $\gamma$ -sugárzást csak Ge(Li) félvezető detektorokkal lehet detektálni, hiszen



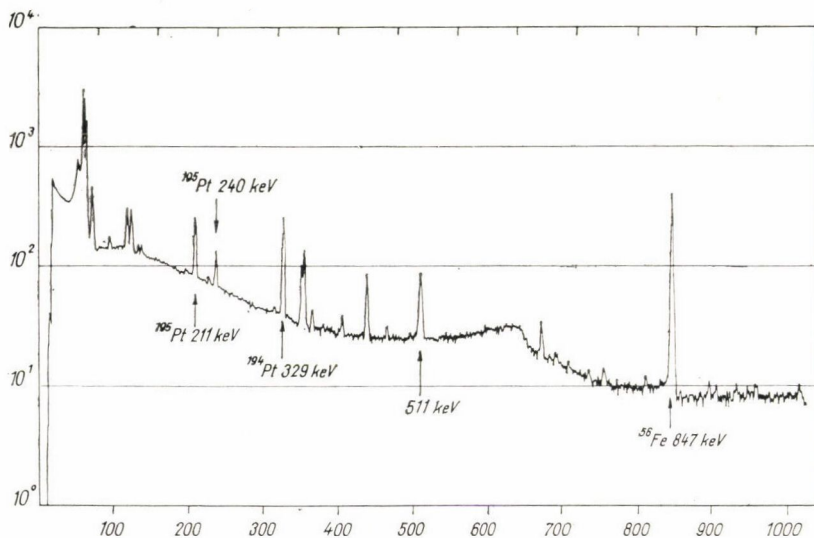
8. ábra. A  $^{195}\text{Pt}$  nívósémája.

az önmagában is komplex spektrumú  $^{195}\text{Pt}$  mellett ott lesz még a többi Pt izotóp, továbbá a céltárgyba beleötvözött ferromágneses elem is.

A 9. ábrán látható egy spektrum, melyet a 27 at% Pt mellett 73% vasat is tartalmazó céltárgyat bombázva  $30\text{ cm}^3$ -es Ge(Li) detektorral vettem fel; nem kétséges: félvezető detektor nélkül a probléma megoldása elképzelhetetlen.

A kérdéses  $g$ -faktorokat a (III. 13.) alatti  $\omega\tau$ -ból határoztam meg; az itt szükséges  $\tau$  magnívó-élettartamokat az irodalomból vettem; az alkalmazott ötvözetben érvényes hiperfinom mágneses tér értékét kísérletileg határoztam meg a módszer megfordításával: jól ismert  $g$ -faktorú nívót ( $^{194}\text{Pt}$ , 329 keV) gerjesztettem, s az arra kapott  $\omega\tau$ -ból származtattam le az aktuális perturbáló térrőt.

$\omega\tau$  megmérése a (III. 11.)-ben adott perturbált szögeloszlás meghatározása útján történt. A perturbálatlan szögeloszlás  $b_k$  együtthatóinak ismeretében (III. 11.) megoldható  $\omega\tau$ -ra. Részben a berendezések, a geometria kontrollja érdekében, de más-



9. ábra. 2,5 MeV-es protonokkal bombázott FePt ötvözet  $\gamma$ -spektruma.

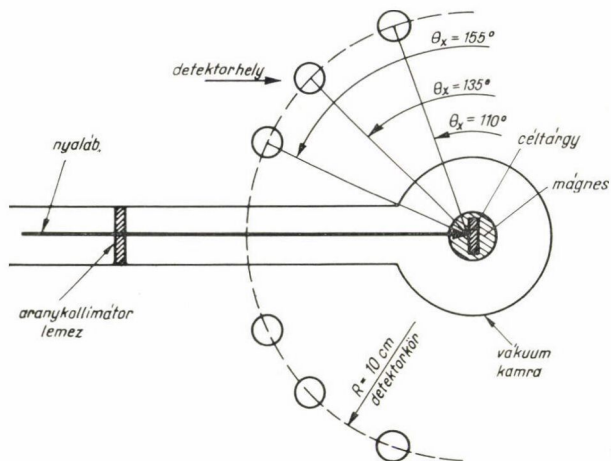


részt az irodalmi adatok ellenőrzéseképpen is kimértem a vizsgált  $\gamma$ -sugárzások szögeeloszlását.

Már az első mérések megmutatták, hogy komoly gondot kell fordítani mind a nyaláb kollimálásra, mind a holtidő-korrekciónak. Bár a gyorsított nyaláb divergenciája a mérés helyén alig éri el az 1–2 mrad-ot, amellet, hogy energiastabilitása (ez számunkra másodrangú kérdés) a jónak mondható 1–2% alatt mozog, mégis a becsapódás helye, a nyalábtengely iránya, az áram intenzitása állandó, részint periodikus, részint statisztikus fluktuációknak van alávetve a gyorsító éppen aktuális „lekiállapotának” (ionforrás instabil hozama, a szalag elhasználódásának foka, az analízáló mágnesbe való belépés hely-bizonytalansága, a fókuszáló mágnes gerjesztésének tökéletlenségei, ennek a geometriai beállítás hibájából adódó következményei, stb.) megfelelően. Az elengedhetetlen kollimátor-rendszer bevezetése óhatatlanul maga után vonta az áramingadozások fokozódását, ami a holtidő-korrekción kivitelezhetetlensége miatt a különböző paraméterek mellett végzett méréseknek a bombázó ösztötlésre történő normálását illuzorikussá tette. A megoldást végül is két detektor egyidejű alkalmazása adta meg. A két detektor jeleit egy ún. „multi-amplitúdó-digitálátalakító” (MADA) konvertálta, és adta be a „4 K” analízátorba. A MADA két független bemenettel rendelkezik; működése olyan, hogy ha az egyik ( $X$ ) bemenetén jel érkezett, akkor a másik ( $Y$ ) bemenetét lezárja, s lezárva tartja mindaddig, míg az  $X$ -beli jelet fel nem dolgozta. Mikor a feldolgozást befejezte, akkor mindkét bemenete megnyílik, és úgy is marad mindaddig, míg akár az  $X$  akár az  $Y$  ágon újabb jel nem érkezik. Annak a valószínűsége, hogy az érkező jel éppen az  $E$  energiájú  $\gamma$ -sugárzástól eredő legyen, továbbá, hogy (mondjuk) az  $X$  detektort találja el, arányos azzal, hogy a kérdéses sugárzás milyen arányban van jelen ebben az időpontban a detektált energiatarományban, s hogy azok milyen gyakorisággal lépnek ki a céltárgyból éppen az  $X$  detektor érzékeny tartománya irányába. Világos, hogy a berendezés „élő” idejét az  $X$  és  $Y$  ágban együttesen érkező szekundumonkénti ( $N_X + N_Y$ ) impulzusszám szabja meg; ha az egyik ág terhelése megnő  $N$ -nel, akkor ennek a hatása abban nyilvánul meg, hogy a berendezés élő ideje lecsökken  $N\tau_h$ -val ( $\tau_h$  a berendezés holtideje), ezért a korábban érvényes  $N_X$ , ill.  $N_Y$  most kisebb, de mindkét ágra nézve azonos arányban csökkent hatásfokkal regisztrálódik. A bombázott céltárgy egy meghatározott sugárzása mindkét detektor spektrumában ad egy-egy csúcst, s ezek intenzitása híven tükrözi a két detektornak a geometriai- és hatásfok-viszonyait, függetlenül attól, hogy a mérés közben melyik detektort milyen egyéb forrásból eredő  $\gamma$ -sugárzás érte. Az egyidejűleg mért két spektrum egyikének valamelyik csúcsát a másik spektrum megfelelő csúcsára normálva nemcsak a holtidő-korrekción problémáját sikerült megoldani, hanem a háttérsugárzások geometriafüggése sem zavar többé, ami különösen jelentős akkor, amikor a szögeeloszlás mérése céljából a detektorokkal mozogni kell.

A mérési elrendezés vázlata felülnézetben látható a 10. ábrán. A kollimátor két-két egymásra merőlegesen elhelyezett, ki-be forgatható, felhasított aranylemezből áll. Aranyat azért választottunk, mert nem ad zavaró vonalakat a szóban forgó mérési tartományban. A céltárgytól távolabbi réspár  $2 \times 2$  mm<sup>2</sup>-es nyílást adott, a közelebbi  $1 \times 1$  mm<sup>2</sup>-eset; ez a két nyílás a köztük levő 70 cm-es távolsággal elég jól idomult a céltárgyhoz közelebbi réspárba fókuszált nyaláb divergenciájához; a céltárgy 20 cm-re van a keskenyebb réspártól. A két detektor 3–3 előre elkészített egyazon körre ( $\varnothing$  20 cm) fúrt lyukakba helyezhető. A céltárgy helyére egy tű hegyére elektrolizált <sup>57</sup>Co forrást lehet elhelyezni; a céltárgy tartó szerelvényeit addig

változtattam, amíg a detektor ugyanannyi 123 keV-es  $\gamma$ -t nem detektált a kör különböző lyukaiba helyezve (a megengedett 0,3%-os hibán belül). Ezután egy távcsővel a forrás hegyét metsző optikai tengelyt jelölve ki, a réseket erre a tengelyre állítottam be. A mechanikai munkák előírt pontossága biztosította, hogy a céltárgy a bemérő tű-forrás helyére kerüljön úgy, hogy a nyaláb a céltárgy síkjára merőlegesen essen be; ezáltal szabadon maradt a  $90^\circ$ — $270^\circ$ -os szögtartomány a detektorok számára.



10. ábra. Targetelrendezés a detektorokkal.

Mérések során több detektort használtam. Az első sorozatokat 15, ill. 8 cm<sup>3</sup>-es vertikális építésű koaxiális Ge(Li) detektorokkal mértem, de alkalmaztam 4, ill. 10 cm<sup>3</sup>-es hasonló felépítésű példányokat is. Tény, hogy a vertikális detektor nagy hátrányt jelent a mérésben, részint azért mert az oldalról jövő  $\gamma$ -sugárzás csak vastag (konstrukciós okokból szükséges) abszorbenseken át juthat a detektor érzékeny részébe, és ráadásul ebből az irányból kapott sugárzásra a felbontóképessége is gyengébb mint a homlokfelülete felől. Mégis mivel a detektorok nem dönthetők, kénytelen voltam a detektálandó sugárzásnak oldalirányból kiteve használni azokat. Legújabban érkezett két horizontális elrendezésű 25, ill. 30 cm<sup>3</sup>-es detektorokkal már sokkal jobb a helyzet. Ezek tették lehetővé az itt közölt, a korábban publikáltaknál pontosabb mérések elvégzését.

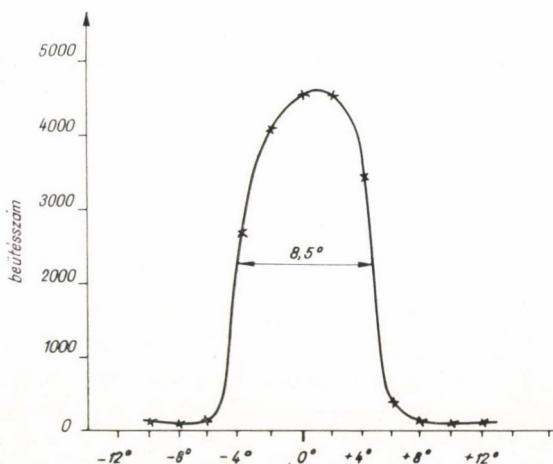
Ami a felbontóképességet illeti, az első mérésekben csak 3—3,5 keV-et lehetett elérni a <sup>57</sup>Co 123 keV-es sugárzásra nézve, ma már optimális esetben 1,7 keV-et is — sajnos, a jó töltéserzékeny előerősítő gyakran hiányzott. A tényleges mérések általában 4—4,5 keV-es felbontással történtek főként az intenzitás (illetve ennek tág határok közötti ingadozása), de nem kis mértékben a detektált  $\gamma$ -sugárzás nagyobb (210—330 keV) energiája miatt. A formáló főerősítőket általában 0,5 és 2  $\mu$ sec-es differenciáló, továbbá ugyanilyen integráló időállandókkal használtam, ez jó kompromisszumnak bizonyult az intenzitás és felbontás tekintetében.

A detektorok geometriai adatait csak tájékoztató jelleggel közölte a gyártó cég, de az a szemből történő felhasználást tartotta szem előtt. Kimértem ezért az általam használni kívánt irányból az érzékenység irányeloszlását. Ebből a célból egy <sup>192</sup>Ir



forrásnak a 296—308—316 keV-es csoportját használtam fel, mivel ez éppen a vizsgált energiatartományba esik.

A forrást egy 2 cm vastag falú ólomhenger középebe tettem, melyen lyuk volt úgy, hogy a rajta kijövő sugárnyaláb  $1,3^\circ$ -os kúpszögben tágult. A forrástól 12 cm-re elhelyezett  $8\text{ cm}^3$ -es detektor a 11. ábrán látható érzékenységet eloszlást mutatva. Megállapíthatjuk, hogy a névlegesen  $2,5\text{ cm}$  átmérőjű detektor gyakorlatban csak  $1,9\text{ cm}$  effektív átmérőt tanúsít. Hasonlóan viselkedett a  $15\text{ cm}^3$ -es detektor is.



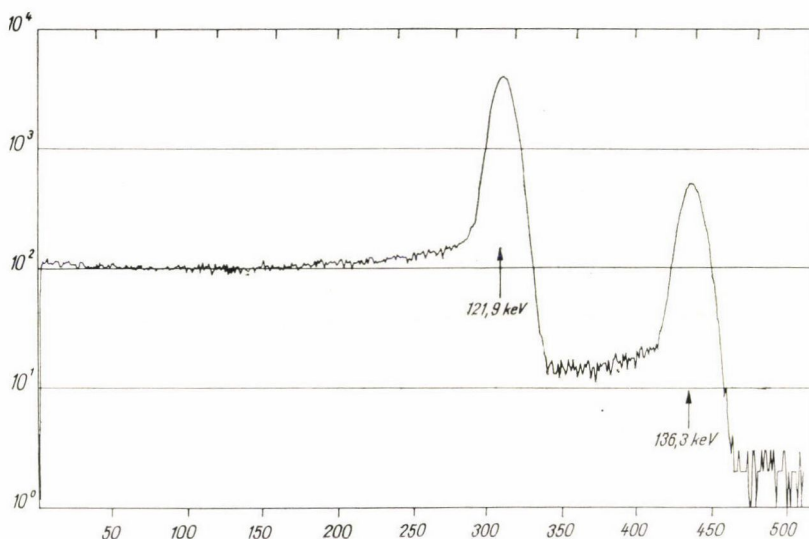
11. ábra. A  $8\text{ cm}^3$ -es Ge(Li) detektor iránykarakterisztikája (forrás-detektor távolság  $6,5\text{ cm}$ ).

A detektorokból kapott adatok a sokcsatornás analízátorból lyukszalagon kinyerhető spektrum formájában jelentek meg, mely minden esetben valamilyen komplex eredetű, többé-kevésbé monoton háttéren ülő csúcsokat tartalmazott. E spektrumok feldolgozását az Intézet ICT 1905 típusú számítógépe végezte el. Ez a folyamat azzal kezdődött, hogy a tárolás és hozzáférhetőség szempontjából előnyös mágnesszalagra lettek felvíve a nyers adatok. Maga a feldolgozás abból állott, hogy a csúcsokat a gép egy algol programmal leválasztotta a háttérrel. Ez a program arra képes, hogy a mért pontokhoz egy másodfokú görbét és több Gauss-görbét illesszen a súlyozott legkisebb négyzetek módszerével.

A program úgy működött, hogy meghatározta mind a háttér, mind a Gauss-görbe paramétereit (azok hibáját), és segítségükkel kiszámította az alattuk levő területet. Mivel ezúttal nem lineáris függvények illesztését kellett elvégezni, ezért a problémát a paraméterektől lineárisan függő egyszerűen kezelhető esetre kellett visszavezetni. Ez oly módon történt, hogy az analízátorból való kiperforálás alkalmával megállapított (nem „túl rossz”) kezdőértékeknek a gép sorfejtést végzett, s a sorfejtéssel megállt az első, a lineáris tagnál. Ekkor az eltérésben lineáris függvényrendszer állt elő; a most alkalmazott legkisebb négyzetek módszerével már a kezdőértékektől való eltérést kellett meghatározni. Az eljárást újólal megismételve, néhány iterációs lépés után a paraméterek értékének a változása megadott érték alá esett, s ekkor a „dekomponálás” véget ért. Az eredmények listáján közölte a gép az emlí-

tett területeket, az illesztési paramétereket és ezek statisztikus hibáit, valamint az illesztés jóságára jellemző  $\chi^2$ -et.

A tapasztalatok szerint jobb az illeszkedés a gyéribb statisztikával felvett spektrumok esetén. Ennek nyilván az az oka, hogy az illesztő függvény és a spektrumalak tökéletlenségeit ilyenkor elmossa a viszonylag nagyobb statisztikus hiba. Van az irodalomban olyan törekvés, mely a csúcshoz illesztendő Gauss-görbét korrigálja a jobb illeszkedés érdekében; ebben az esetben azonban nem ilyen eredetű a hiba. A problémák gyökere kettős: első a csúcstól az egyik oldalán torzító „pile-up” effektusnak a gyorsító áramingadozásából eredő időszakos megjelenése; másik (a nagyobb) hiba pedig a háttérnek a detektor felépítéséből eredően szükségképpen nem monoton volta. Az első ellen lehetne védekezni a nagyobb számolási sebességhez jobban illeszkedő (bár a felbontásnak némiképpen rovására történő) erőteljesebben differenciáló formálás alkalmazásával. A második effektus jól látható a 12. ábrán:



12. ábra.  $^{57}\text{Co}$   $\gamma$ -spektruma.

a 123 keV-es csúcstól egy lépcső élén ül, mely onnan ered, hogy a Ge(Li) detektornak az érzékeny térfogatával nagyon is összemérhető érzéketlen magjában és héjában Compton-szórt  $\gamma$ -sugarak egy része foto-abszorpciót szenved az érzékeny térfogatban. Ennek a programban történő figyelembevételére történtek lépések, de megoldás még nem született. Igaz, az illeszkedés így módon megenged némi hibát ( $\sim 1\%$ ) a csúcstól alatti terület meghatározásában, de az itt kidolgozott módszer úgy operál az adatokkal, hogy a belőlük levont következtetésre nem hat ki az így elkövetett hiba.

A természetes izotópösszetételű Pt céltárgyból a 2,5 MeV-es protonokkal történő Coulomb-gerjesztést követően kilépő  $\gamma$ -sugarak szögeloszlása három vonalra lett kimérve: a  $^{194}\text{Pt}$  329 keV-es  $2^+$ -os, a  $^{195}\text{Pt}$  240 keV-es  $5/2^-$ -os és a  $^{195}\text{Pt}$  211 keV-es  $3/2^-$ -os nívókról jövő sugárzásoké. A mérés úgy történt, hogy a nyaláb irányához képest  $225^\circ$ -ra fixen elhelyezett detektor jeleit a MADA Y ágával, a rendre  $110^\circ$ ,  $135^\circ$  és  $155^\circ$ -ra fűrt lyukakba betett detektorét pedig az X ággal analizálva, a sok-



csatornás analízátor második, ill. első 256 csatornájában lett tárolva. A spektrumok dekomponálása után a három vizsgálni kívánt  $\gamma$ -sugárzásnak a fotocsúcs alatti területéből az  $X$  detektor pozícióinak megfelelően három-három viszonyszámot kaphatunk. Ezek a viszonyszámok még függenek ugyan a detektorok geometriai adatától ( $F$  a felülete,  $r$  a forrástól vett távolsága), hatásfokától ( $\varepsilon$ ), a kérdéses  $E$  energiájú sugárzás szögeloszlásfüggvény  $W(\theta)$  mellett

$$\frac{N_X(E_\gamma, \theta_X)}{N_Y(E_\gamma, \theta_X, 225^\circ)} = \frac{r_Y^2}{r_X^2} \frac{F_X}{F_Y} \frac{\varepsilon_X(E_\gamma)}{\varepsilon_Y(E_\gamma)} \cdot \frac{W(E_\gamma, \theta_X)}{W(E_\gamma, 225^\circ)} \quad (1)$$

de ennek a pl.  $\theta_X = 155^\circ$ , ill.  $135^\circ$  mellett mért értékéből képezett  $w$  viszonyszám

$$w = \frac{N_X(E_\gamma, 155^\circ)}{N_Y(E_\gamma, 155^\circ, 225^\circ)} \cdot \frac{N_Y(E_\gamma, 135^\circ, 225^\circ)}{N_X(E_\gamma, 135^\circ)} = \frac{W(E_\gamma, 155^\circ)}{W(E_\gamma, 135^\circ)} \quad (2)$$

már kizárólag a szögeloszlásfüggvény  $155^\circ$  és  $135^\circ$ -nál felvett értékeinek a viszonyát adja. Hasonlóképpen a  $v = W(110^\circ)/W(135^\circ)$  esetében is  $w$  és  $v$  két mért mennyiségből meghatározható a  $b_2$  és  $b_4$  szögeloszlási együtthatók értéke, melyeket az I. táblázat tartalmaz a három említett vonalra.

### I. TÁBLÁZAT

A szögeloszlás mérés  $v$  és  $w$  eredményei

	$^{194}\text{Pt}$ (329 keV)	$^{195}\text{Pt}$ (211 keV)	$^{195}\text{Pt}$ (240 keV)
$v$	0,8051 (60)	0,9514 (83)	0,8591 (122)
$w$	1,0889 (70)	1,0413 (86)	1,0827 (145)

Ennél a pontnál egy pillanatra megállva, fel kell hívni a figyelmet arra a korábban tett kijelentésre, miszerint a kiértékelés módja megszünteti a dekomponálásból fakadó kisebb hibának a fizikai következtetésre való hatását. Ha ugyanis a (2)-beli  $w$ -ben  $N_X(135^\circ)$  a tényleges  $N_X(135^\circ)$  és valami  $\gamma_X(135^\circ)$  háttérjárulék összege, az  $N_X(155^\circ)$  ugyanezeket a mennyiségeket tartalmazza a szögeloszlás  $n_X(155^\circ)$  járuléka mellett, természetesen a különböző mérési időket tükröző konstans faktortól eltekintve

$$N_X(135^\circ) = N'_X(135^\circ) + \gamma_X(135^\circ)$$

és

$$N_X(155^\circ) = [N'_X(135^\circ) + \gamma_X(135^\circ) + n_X(155^\circ)]\alpha.$$

Az  $Y$  detektor beütésszáma nem tartalmazza a szögeloszlás hatását, csak normáló szerepe van, így

$$\frac{N_Y(155^\circ, 225^\circ)}{N_Y(135^\circ, 225^\circ)} = \alpha$$

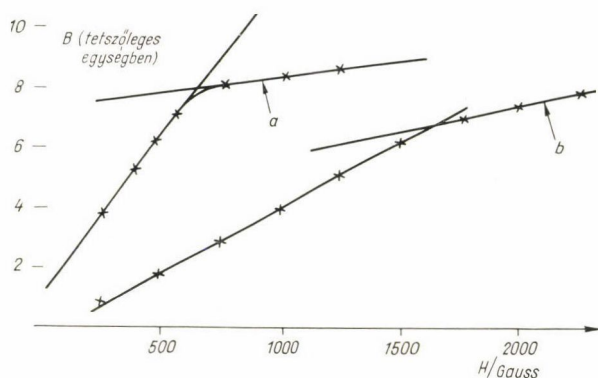
és

$$w = \frac{1 + \frac{\gamma_X(135^\circ)}{N'_X(135^\circ)} + \frac{n_X(155^\circ)}{N'_X(135^\circ)}}{1 + \frac{\gamma_X(135^\circ)}{N'_X(135^\circ)}} = 1 + \frac{n_X(155^\circ)}{N'_X(135^\circ) + \gamma_X(135^\circ)}. \quad (3)$$

Itt most már valóban látszik  $\gamma_X(135^\circ)$  alárendelt jelentősége. A fentiek hallgatólagoosan feltételezik az egyes ágak spektrumának az  $n_X$  erejéig azonos alakját; ez a tapasztalatok szerint feltétlen jogos is.

A szögeloszlásfüggvények perturbációját a hiperfinom kölcsönhatásból származó mágneses tér végezte. A mérések elsősorban  $\text{Fe}_{73}\text{Pt}_{27}$  összetételű ötvözzel történtek, de vannak adatok 50—50%-os ötvözzel is. Ez utóbbiak a közelmúlt eredményei, melyek célkitűzése egészen más (még nem publikált és itt sem részletezendő), de a statisztikus hiba csökkentése érdekében a kiértékeléskor ezeket is felhasználtam. Az ötvözetek az Intézet Szilárdtestfizikai Osztályán készültek vákuumkemencében indukciós módszerrel olvasztva.

Az ötvözetet külső mágneses tér polarizálta. A teljes polarizáláshoz szükséges mágneses térerősség kimérése úgy történt, hogy a mintára  $\sim 150$  menetes tekercset csévéltem, a tekercs végeit ballisztikus galvanométer lengőtekercsére kapcsoltam,



13. ábra. Az  $\text{Fe}_{72.5}\text{Pt}_{27.5}^{(a)}$  és  $\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}^{(b)}$  összetételű ötvözet mágnesezési görbéje (szobahőmérsékleten).

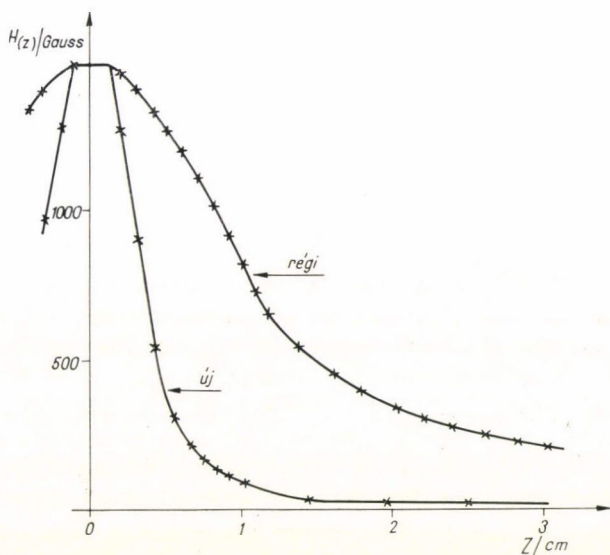
mely a fluxusváltozással arányos amplitúdójú kilengést végzett a minta átmágnesezésekor. Hogy a Lorentz-féle lemágnesező tér hatása zavaró ne legyen, azért a telítődési méréseket henger alakú próbatestekkel végeztem, úgy helyezve el azokat a térben, hogy az erővonalak merőlegesen essenek be a henger alap, ill. fedőlapjára; ugyanakkor a céltárgyak ehhez képest vékony lemezek voltak lapjukkal az erővonalakkal egy síkban. Az előző esetben adódó telítési mágneses tér nagyobb mint ami a későbbiekben használt vékony, lapos minták telítéséhez kell a Lorentz-féle lemágnesező tér geometriafüggése miatt; ha a próbatest gerjesztési görbéjének töréspontjához tartozó mágneses tér polarizálja a bombázott mintát, akkor az feltehetőleg telítésig mágnesezett lesz. A 27, ill. 50 atom%-os PtFe ötvözetek mágneses gerjesztésének a görbéi a 13. ábrán láthatók.

A céltárgyak bombázás közbeni gerjesztése két különböző elektromágnessel történt. Az első példány pólusátmérője 1 cm, a légrés 0,8 cm volt. A mágneses kör vákuumtérén kívül záródott egy 20 cm hosszú vasjáromban. A nyaláb tengelye mentén egy 2% pontosságú Hall-szondával kimért téreloszlást mutat a 14. ábra. Ez a tér, ha kicsit is, de megváltoztatja a nyaláb pályáját: mégpedig egyrészt az irányát ( $\epsilon$ ), ami a szögeloszlás-kép „0”-irányát hamisítja meg, másrészt a



a becsapódás helyét tolja el ( $s$ ) a térmentes állapothoz képest. E két hatás számítása az egyszerűség kedvéért úgy történt, hogy a  $H(Z)$  függvény apró  $\Delta Z$  hosszúságú elemi szakaszokra lett bontva, ezeken belül a tér már homogénnek tekinthető; az elemi szakaszban aktuális körpályán való eltérés hozzá lett adva az előzőhöz, mindaddig, amíg a térmentes helyről a céltárgyig nem értünk. E célra egy algoritm program készült.

Mivel bizonyos körülmények között a nyalábeltérés zavaró hatása, ezért egy másik mágnes is készült, melyben ez az effektus minimálisra csökkent. Ez a mágnes egy 0,5 cm átmérőjű lágyvas anyagú 3 cm külső átmérőjű tórusz, a gyűrűből 3 mm ki van vágva, ez a légrés. A radikális hatás ugyancsak a 14. ábrán látható. Az  $\varepsilon$  és



14. ábra. Téreloszlás a régi illetve új mágnesben.

s számított értékei a II. táblázatban sorakoznak, melyeket összehasonlíthatunk az előbbi elrendezés ugyanitt látható adataival. Ez a kis mágnes már nem volt a vákuumkamrán kívülre helyezhető, viszont a menetek melegevéssé rossz hatással lett volna mind a vákuumra, mind a tekercsre magára, ezért a következőkben ismertetendő minta-hűtő vörösréz rúdra ez is rá lett szerelve. A hűtés következtében a gerjesztő teljesítmény is lecsökkent egy nagyságrenddel a szobahőmérsékleti értékhez képest.

A fent említett vörösrézre forrasztóon rögzítette a céltárgyat. A hűtése ez utóbbinak is nagyon fontos, mert a 2,5 MeV-es  $1 \mu\text{A}$  körüli protonáram okozta lokális felmelegedés elronthatja a minta polarizáltságát.

A bombázó nyaláb nagyjából egyenletes sűrűséggel ért egy kb.  $1,2 \times 1,2 \text{ mm}^2$ -es felületet; ettől mintegy 2–3 mm-re volt egy réz-konstantán hőelem. E hőmérő helyén (bombázás közben)  $-150^\circ\text{C}$  hőmérséklet volt mérhető.

E fejezet záróaktusaként foglalkozunk most a  $g$ -faktort tartalmazó  $\omega\tau$  meghatározásával. A (III. 11.)-ben adott perturbált szögeloszlásfüggvény  $\theta = 45^\circ + n \cdot 90^\circ$  körül a legérzékenyebb  $\omega\tau$ -ra ( $b_4 = 0$  esetén pontosan itt, de  $b_4 \neq 0$  esetben sem nagyon

tér el ettől, mert  $b_4$  rendszerint  $\ll b_2$ ). Ha nem akarjuk a szögeloszlásfüggvényt kimérni a perturbálatlan esethez hasonlóan (márpedig ez a mi esetünkben várható  $\omega\tau \ll 1$  miatt nem is volna egy járható út  $\omega\tau$  meghatározására), akkor legcélszerűbb a  $\theta = 45^\circ$ , vagy ezzel egyenértékű helyre beállva maximális hatásfokkal detektálni a szögeloszláskép elforgását a polarizáló (és az ennek következményeképpen előálló hiperfinom perturbáló) mágneses tér polaritásának az átváltása következtében. A korábbi normálási és holtidő-korrektíós problémák ezúttal is felléptek volna, azonban a szögeloszlás méréshez hasonlóan szintén két detektorral, MADA-val

## II. TÁBLÁZAT

Nyalábeltérülés adatai

	$\varepsilon/\text{mradián}$		s/cm	
$H/\text{Gauss}$	1500	2500	1500	2500
régi mágnes	11		0,03	
új mágnes	3	5	0,0009	0,0015

analizálva történtek a mérések. A (mondjuk) felfelé irányuló polarizáló tér esetén mért két spektrumban az azonos energiájú  $\gamma$ -tól eredő csúcsok területének az  $N_X(H^\dagger)/N_Y(H^\dagger)$  viszonya itt is tartalmazza (1)-hez hasonlóan a geometriai faktorok mellett a perturbált eloszlásfüggvényeket, melyek most részletezve

$$\frac{N_X(H^\dagger)}{N_Y(H^\dagger)} = \frac{r_X^2}{r_Y^2} \cdot \frac{F_X}{F_Y} \frac{\varepsilon_X}{\varepsilon_Y} \frac{1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k \cos k(\theta_x - \Delta\theta)}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}}}{1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k \cos k(\theta_y - \Delta\theta)}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}}} \quad (4)$$

illetve ez kifejtve a  $\theta_x = 135^\circ$  és  $\theta_y = 225^\circ$ -nak megfelelően

$$\frac{N_X(H^\dagger)}{N_Y(H^\dagger)} = \frac{r_X^2}{r_Y^2} \cdot \frac{F_X}{F_Y} \frac{\varepsilon_X}{\varepsilon_Y} \frac{1 - \frac{b_2 x}{1 + x^2} - b_4 \frac{1}{1 + 4x^2}}{1 + \frac{b_2 x}{1 + x^2} - b_4 \frac{1}{1 + 4x^2}} \quad (4a)$$

kifejezést adják, ahol most is az  $x = 2\omega\tau$  jelöléssel élünk. (Nem tévesztendő össze ez az  $x$  a detektorok egyikének indexével!)

A mágneses teret ellenkező előjelűre váltva át, a geometriai faktorok természetesen nem változnak, de az eloszlásfüggvények viszonyában az  $x$  átváltja az előjelét. Ha tehát az  $X$  és  $Y$  detektornak az ellenkező polaritású tér mellett mért spektrumának az előzővel azonos energiájú csúcspárjára képezzük az  $N_X(H^\dagger)/N_Y(H^\dagger)$  viszonyt, majd ezzel osztjuk (4)-et, akkor

$$Q^2 = \frac{N_X(H^\dagger)}{N_Y(H^\dagger)} \cdot \frac{N_Y(H^\dagger)}{N_X(H^\dagger)} = \left( \frac{1 - \frac{b_2 x}{1 + x^2} - \frac{b_4}{1 + 4x^2}}{1 + \frac{b_2 x}{1 + x^2} - \frac{b_4}{1 + 4x^2}} \right)^2 \quad (5)$$

kifejezés adódik, melyet  $x$ -re megoldva  $\omega\tau$ -t kapjuk.



Most is ki kell hangsúlyozni  $Q^2$ -nek a geometriától, a holtidőtől, továbbá a dekomponálás tökéletlenségeitől való függetlenségét.

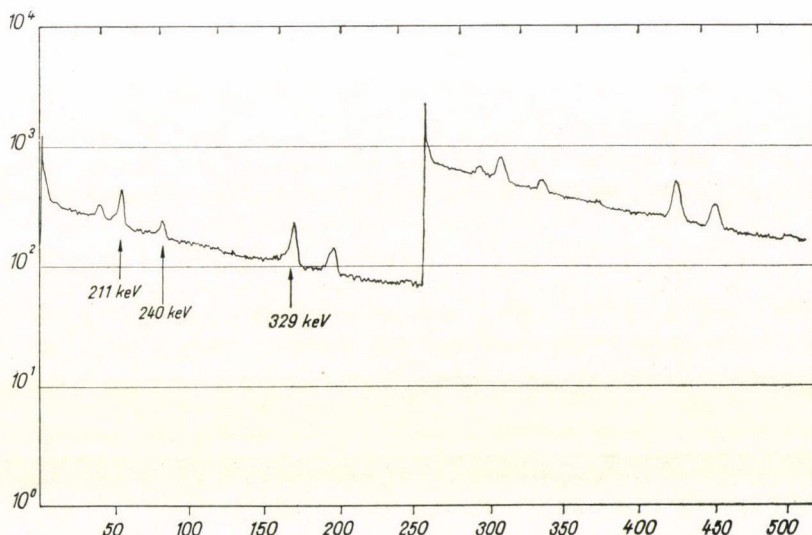
A  $Q^2$ -ből kifejezzük

$$q = \frac{Q-1}{2b_2} = \frac{x}{1+x^2+b_2x-b_4\frac{1+x^2}{1+4x^2}}. \quad (6)$$

A jó normálási lehetőségek esetén szokásos egy detektoros elrendezésnél a mérés az  $R$  mennyiség meghatározását célozza, mely az itteni  $N_X^\dagger$ , ill.  $N_X^\ddagger$  értékekkel az

$$R = 2 \frac{N_X^\dagger - N_X^\ddagger}{N_X^\dagger + N_X^\ddagger} = - \frac{2b_2x}{1+x^2-b_4\frac{1+x^2}{1+4x^2}} \quad (7)$$

emiatt a  $b_2x \ll 1$  esetén nyilván lehetséges az  $(1-R) \rightarrow Q$  megfeleltetés. Amíg azonban  $\Delta Q/Q$  az (5) alapján  $\sim \Delta N/N$ , addig a  $\Delta(1-R)/(1-R) \simeq 2 \cdot \Delta N/N$ . Látjuk



15. ábra

tehát, hogy a normálási nehézségek miatt vállalt második detektor az információ megduplázódása következtében a hibát is megfelelő arányban csökkenti, tehát gyorsítja a méréseket.

Első vizsgálatok során kb. 1—2 óráig folytak a mérések egy polarizáló tériránnyal, majd kb. ugyanannyi ideig, vagy inkább kb. ugyanannyi bombázó össztöltés begyűltéig az ellenkezővel. Ma már automatikus a mérés úgy, hogy a térirányt átváltva az analizátorban is másik  $2 \times 256$  csatornás egységbe történik a tárolás.  $H^\dagger$  mellett az első  $2 \times 256$ -ban,  $H^\ddagger$  esetén a második  $2 \times 256$  csatornában folyik a tárolás. Egy-egy tériránnyal előre beállítható ideig lehet mérni; az átkapcsolás idején (kb. 0,8 sec időtartamig) szünetel a tárolás, nehogy a térváltás okozta szikrá-

zások vagy az átkapcsolás idején polarizálatlan céltárgy sugárzása meghamisítsa a mérési eredményeket.

A detektorok adta spektrumnak csak az itt fontos része lett tárolva. Nagyon kényelmes lett volna ugyan az adatok gyűjtése más gerjesztett állapotokra vonatkozólag is, de a 256 csatornából akkor csak nagyon kevés jutott volna egy-egy csúcsra, ami károsan hat a dekomponálásra, ugyanakkor az analizátor holtidejét is nagyon megnövelte volna a nagyobb impulzusszám.

Egy tipikus kettős spektrumot mutat be a 15. ábra, a mérési eredményeket jelentő  $Q^2$ -et pedig a III. táblázat tartalmazza.

### III. TÁBLÁZAT

$Q^2$  értékek

mágnes	ötvezet	$^{194}\text{Pt}$ (329 keV)	$^{195}\text{Pt}$ (211 keV)	$^{195}\text{Pt}$ (240 keV)
régi	$\text{Fe}_{72,5}\text{Pt}_{27,5}$	0,8861 (42)	0,9493 (95)	0,8389 (151)
új		0,8842 (44)	0,9490 (103)	0,8465 (934)
	$\text{Fe}_{30}\text{Pt}_{50}$	0,9217 (43)	0,9690 (70)	0,8824 (150)

### V. FEJEZET

#### Kiértékelés és diszkusszió

Az előző fejezetben megadott eredmények kiértékelését a szögeloszlásméréssel kezdjük. Az I. táblázat a három vonalra mért  $w$  és  $v$  értéket adja meg; tekintsük először a  $^{194}\text{Pt}$  mag gerjesztéséből eredő 329 keV energiájú  $\gamma$ -sugárzás adatait.

A mi bombázó energiánk mellett a  $^{194}\text{Pt}$ -ben csak az első gerjesztett nívó populálódik, amint azt ékesen bizonyítja a 9. ábrán látható spektrum, miszerint sem az alapállapot 622 keV-es vonal, sem a 329 keV-en át vezető 293 keV-es átmenet nyoma nem látható. Világos tehát, hogy az összes 329 keV-es  $\gamma$ -kvantum a  $0^+ \rightarrow E2 \rightarrow 2^+ \rightarrow E2 \rightarrow 0^+$  átmenetből ered. A IV. táblázatban megtekinthetjük a  $w$  és  $v$ -ből számítható  $b_k$ -kat, az ezekkel lineáris kapcsolatban álló  $a_k A_k$ -kat, az ezután kapható  $A_{k\text{exp}}$  kísérleti szögkorrelációs együtthatókat, végezetül a fent jelzett átmenetre érvényes  $A_{k\text{elm}}$  elméleti értékeket. Két nagyon fontos megállapítást tehetünk:

1. Mivel az  $A_{k\text{elm}}$  és  $A_{k\text{exp}}$  egyezése kifogástalan, nyugodtan állíthatjuk, hogy sem a lefékeződés, sem az azt követő periódusban nem lép fel semmiféle perturbáció; a detektor véges térszöge miatti attenuáció sem áll fenn, bár ezt már a detektor iránykarakterisztikájának a kimérése is valószínűsítette.

2. A mérési elrendezés geometriai pontossága, a normálási módszer megbízhatósága teljesen kielégítő.

A  $^{195}\text{Pt}$  211 keV,  $3/2^-$  és 240 keV  $5/2^-$  állapotaiból eredő  $\gamma$ -sugarakkal kapott  $w$  és  $v$  értékekből adódó  $b_k - k$ , majd pedig az  $a_k A_k$  mennyiségek a IV. táblázatban sorakoznak. A szóban forgó magnak az említett két gerjesztett állapota feletti nívói Coulomb-gerjesztéssel nem populálódnak. Igaz, *Blaugrund* magánközlésére hivatkozva *McGowan* és *Stelson* (1959) vizsgáltak egy bizonyos 420 keV-es nívót,



mely úgy látszott, hogy 210—210 keV-es kaszkáddal bomlik, de az újabb mérések leírásában (*Grodzins és mások*, 1966; *Bruton és mások*, 1970) erről semmi említés nem történik, sőt *L. Keszthelyi* (1970) szerint a *Bruton és társai* (1970) mérése során a kihangsúlyozott keresés ellenére sem sikerült nyomát találni. *Blaugrund és munkatársai* (1965) meghatározták elektronikus időmérő módszerekkel a 211 keV-es nivó élettartamát:  $97 \pm 7$  psec, az ebből adódó  $B(E2)$  a 211 keV-es nivóra nagyon jól egyezik a Coulomb gerjesztésből adódó értékkel, ha figyelembe vesszük *Schönebergék* (1967) eredményét, miszerint a 240 keV-es nivó 28%-ban egy 29 keV-es átmenettel

## IV. TÁBLÁZAT

A szögeleszlás-mérés eredményei

	<sup>194</sup> Pt (240 keV)	<sup>195</sup> Pt (211 keV)	<sup>195</sup> Pt (240 keV)
$b_2$	0,1983 (63)	0,0682 (75)	0,1573 (138)
$b_4$	-0,0421 (48)	0,0027 (54)	-0,0200 (135)
$a_2 A_2$	0,3147 (97)		0,237 (22)
$a_4 A_4$	-0,0822 (92)		-0,045 (30)
$a_2$	0,883	0,7340	0,783
$a_4$	-0,073		-0,039
$A_{2 \text{ exp}}$	0,3564 (110)	$\delta = 0,418$ (20)	0,301 (29)
$A_{4 \text{ exp}}$	1,125 (126)		1,150 (770)
$A_{2 \text{ elm}}$	0,3571		0,2857
$A_{4 \text{ elm}}$	1,143		0,3810

a 211 keV-es nivót táplálja. Ezek után elfogadhatjuk azt, hogy magasabb energiájú gerjesztett állapotok nem adnak járulékot e sugárzásokhoz.

A 9. ábrán bemutatott spektrum alapján megállapíthatjuk azt is, hogy a céltárgy szennyezései sem adnak ilyen energiájú sugárzást, mivel a fenti három csúcs megfelelő felérték-szélességű a többi pedig jól értelmezhető.

Valóban a 240 keV-es  $\gamma$ -sugárzásra mért  $w$  és  $v$  a 329 keV-es esetben látottakkal azonos lépések után a IV. táblázata tanúsága szerint, nagyon kielégítő egyezést ad az ily módon várható  $1/2^-E2-5/2^-E2-1/2^-$  átmenetre előírt elméleti szögeleszlási együtthatókkal. Ezáltal nemcsak bizonyítja, hogy nincs magasabb szintű járulék, hanem a fentebb említett kétpontos konklúzió kétségtelen érvényességét is hangsúlyozza.

A 211 keV-es sugárzásra kapott  $w$  és  $v$  adatokból ki lettek számítva a  $b_2$ , ill.  $b_4$  értékek. A  $b_4$  nagy hibával ugyan, de nagyon kicsinek adódott; a későbbi számítások során ezt elhanyagoljuk. A  $b_2$ -ből ily módon származtatható  $a_2 A_2$  kétféle eredetű 211 keV-es gerjesztett állapotból jövő  $\gamma$ -sugarak eredő szögeleszlási együtthatója. Az egyik rész nyilván a nivó közvetlen gerjesztését reprezentáló  $1/2^-E2-3/2^-M1$  vagy  $E2-1/2^-$  átmenetnek felel meg, míg a másik, a *Schönebergék* (1967) által felfedezett kaszkádatmenet eredménye:

$$1/2^-E2-5/2^-(240 \text{ keV})-M1(29 \text{ keV})-3/2^-(211 \text{ keV})-M1$$

vagy  $E2(211 \text{ keV})-1/2^-(0)$ . *Alderék* (1954) vastag targetre vonatkozó „hozam”-formulája alapján kiszámolható a két ág relatív intenzitása, természetesen a korrigált  $B(E2, 240)$ , ill.  $B(E2, 211)$  értékeket használva. Eredményül az adódott, hogy

72%-ban ered közvetlen gerjesztési folyamatból, a többi a másikból. A közvetlen ág szögeloszlása

$$W_d \propto 1 + \frac{a_{2d}}{4} \cdot \frac{-1 + 2\sqrt{3} \delta + \delta^2}{1 + \delta^2} P_2(\cos \theta) \quad (1)$$

ugyanakkor a közvetett rész szögeloszlását

$$W_i \propto 1 + \frac{a_{2i}}{5} \cdot \frac{-1 + 2\sqrt{3} \delta + \delta^2}{1 + \delta^2} P_2(\cos \theta) \quad (2)$$

írja le.

Nyilván, az  $a_{2d}$  a 211 keV-es nivó gerjesztésére vonatkozó részecske-paraméter, míg az  $a_{2i}$  a 240 keV-esre. A két szögeloszlás súlyozott összegének ki kell adni a kísérleti  $a_2 A_2$  értéket, ami alkalmas  $\delta$  meghatározására. Eredményül

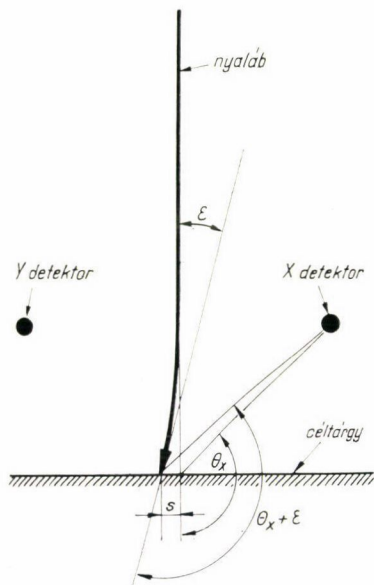
$$\delta = +0,42 \pm 0,02 (4,8\%) \text{ vagy } -7,6^{+0,7}_{-1,3} \quad (3)$$

adódott, mely két érték közül az első van összhangban a 211 keV-es sugárzásnak *Sliv és Band* táblázatából (1961) vehető elméleti  $K/L$  viszonytal és a *Bernstein és Lewis* (1955) konverziós elektron-méréséből ismert kísérleti  $K/L = 6$  értékkel.

A 211 keV-es  $\gamma$ -sugárzásnak a szögeloszlásával foglalkozott már *McGowan és Stelson* (1959) is. Az ő eredményük  $\delta = +0,37 \pm 0,02$  volt. Ők még nem tudhattak arról, hogy a 240 keV-es nivóról van átmenet a 211-esre.

Ha nem veszünk tudomást a kaszkádátmenetről, akkor a mi mérésünkben  $\delta = 0,41 \pm 0,02$  következne, mely hibán belül megegyezik *McGowan és Stelson* (1959) eredményével.

A perturbált szögeloszlás mérések során kapott  $Q^2$ -értékek és a  $b_k$ -k birtokában a (IV. 6.) képlet segítségével meghatározhatnánk a  $g$ -faktort tartalmazó  $\omega\tau$ -kat, előbb azonban egy nagyon fontos korrekcióval a nyalábeltérülés járulékának figyelembevételével kell foglalkoznunk. Különösen fontos ezt megtenni az első mágnessel végzett mérések eredményeivel, bár a kisméretű mágnes esetében végzett első mérések 1500 Gauss külső mágneses tér jelenlétében folytak, mely a nyalábeltérülés révén  $\varepsilon = 11$  mrad-iánnal elforgatta, és  $s = 0,03$  cm-rel eltolta a nyaláb és a tér irányára merőleges irányban a



16. ábra. Nyalábeltérülés az ábra síkjára merőleges tér hatására

koordináta-rendszert. Ha a nyaláb és a detektorok által kifeszített síkban a pozitív szögeket a nyaláb irányától az óramutató járásával ellentett irányban mérjük, a  $+H$  mágneses térerősséget jobbrendszerben véve fel a síkra merőlegesen, akkor a tér a 16. ábra szerint téríti el a nyalábot. Ez az eltérés azt okozza, hogy az  $X$  detektor  $r_x$  távolsága megnő  $r_x \left(1 + \frac{s}{\sqrt{2} \cdot r_x}\right)$ -szeresére, az  $Y$ -é pedig lecsökken  $r_y \left(1 - \frac{s}{\sqrt{2} \cdot r_y}\right)$ -



szor, a szögeket pedig  $-\varepsilon$ -tól kell mérni. Ily módon a (IV. 4.)-ben szereplő kifejezésnek az alakja ezúttal

$$\frac{N_X(H^\dagger)}{N_Y(H^\dagger)} = \frac{r_Y^2 \left(1 - \frac{s}{\sqrt{2} r_Y}\right)}{r_X^2 \left(1 + \frac{s}{\sqrt{2} r_X}\right)} \cdot \frac{F_X \varepsilon_X}{F_Y \varepsilon_Y} \cdot \frac{1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k \cos k(\theta_x + \varepsilon - \Delta\theta)}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}}}{1 + \sum_{k=2,4} \frac{b_k \cos k(\theta_y + \varepsilon - \Delta\theta)}{\sqrt{1 + (k\omega\tau)^2}}} \quad (3)$$

Ez pedig kifejtve a  $\theta_x = 135^\circ$  és  $\theta_y = 225^\circ$  értékek mellett, most az

$$\frac{N_X(H^\dagger)}{N_Y(H^\dagger)} = \frac{F_X \varepsilon_X}{F_Y \varepsilon_Y} \cdot \frac{r_Y^2 \left(1 - \frac{s}{\sqrt{2} r_Y}\right)^2}{r_X^2 \left(1 + \frac{s}{\sqrt{2} r_X}\right)^2} \cdot \frac{1 - \frac{b_2(x-2\varepsilon)}{1+x^2} - b_4 \frac{1+8\varepsilon x}{1+4x^2}}{1 + \frac{b_2(x-2\varepsilon)}{1+x^2} - b_4 \frac{1+8\varepsilon x}{1+4x^2}} \quad (4)$$

alakot ölti. Ha most  $H^\dagger$ -ot az ellenkezőjére váltjuk át, akkor megfordul az előjele  $s$ ,  $x$  és  $\varepsilon$ -nak is. Így (4) alatti kifejezés jobb oldala a reciprokéra változik, tehát a (IV. 5.)-ben definiált  $Q^2$  most is azonos a 4. jobb oldalának az  $\frac{F_X \varepsilon_X}{F_Y \varepsilon_Y}$  nélkül vett négyzetével.

Mivel  $s/r \ll 1$ , azért a  $Q^2$ -ben szereplő  $\left(1 - \frac{s}{\sqrt{2} r_Y}\right)^2 / \left(1 + \frac{s}{\sqrt{2} r_X}\right)^2$  helyett joggal használhatjuk az  $(1 - \sqrt{2} s) / \left(\frac{1}{r_X} + \frac{1}{r_Y}\right)$  egyszerűbb alakot. A (IV. 6.)-al analóg  $q'$  most végülis a

$$q' = \frac{1 - \frac{Q}{1 - \sqrt{2} s \left(\frac{1}{r_X} + \frac{1}{r_Y}\right)}}{2b_2} = \frac{x - 2\varepsilon}{1 + x^2 + b_2(x - 2\varepsilon) - b_4(1 + 8\varepsilon x)} \cdot \frac{1 + x^2}{1 + 4x^2} \quad (5)$$

alakot ölti. Látjuk tehát, hogy a jobb oldali nevezőnek a kis  $x$  és  $\varepsilon$  esetén alig észrevehető hatásától eltekintve az  $x$  és  $\varepsilon$  additív mennyiségek. A  $Q$ -t osztó tényező nagyon kevésbé tér el 1-től, s  $Q$  is hasonló tulajdonságú, ezért  $q$  nem nagy hibával két részre bontható:

$$q \simeq \frac{1 - Q}{2b_2} - \frac{Qs \left(\frac{1}{r_X} + \frac{1}{r_Y}\right)}{\sqrt{2} b_2} = q_0 - q_s \quad (6)$$

Látjuk tehát, hogy a magfizikai eredetű  $q$ -hoz egy a nyalábeltérülésből eredő  $q_s$  járul, melynek jelentősége egyre kihangsúlyozottabbá válik, ahogy  $b_2$  csökken. Vegyük észre még azt is, hogy  $x$  mellett negatív előjellel lép fel az  $\varepsilon$ , tehát  $\varepsilon$  és  $q_s$  a  $b_2 > 0$  esetén a  $+135^\circ$  és  $225^\circ$ -nál elhelyezett detektor-elrendezés alkalmazásakor

igyekeznek egymás hatását lerontani. A  $Q$  és nyalábeltérülés fenti viselkedését már *Bruton és társai* (1970 a) is megfigyelték.

A 329 keV-es nívóra vonatkozó eredmények az V. táblázatban találhatók. Az  $\omega\tau$  értékek az (5) képlet alapján lettek számolva, de láthatjuk az itt aktuális  $\varepsilon$  és  $\frac{q_s}{2}$  mennyiségeket is. Nagyon érdekes, hogy  $\varepsilon$  és  $\frac{q_s}{2}$  éppen kikompenzálják egymást ennek az átmenetnek  $b_2$ -je miatt.  $\frac{q_s}{2}$  számításához a II. táblázat aktuális  $s$ -adata és az  $r_X=r_Y=10$  cm detektortávolság lett felhasználva.

#### V. TÁBLÁZAT

A  $^{194}\text{Pt}$  mag 329 keV-es nívójára kapott  $\omega\tau$  értékek és azok nyalábeltérülési korrekciója

mágnes	ötvözet	$\omega\tau$	$\varepsilon$	$\frac{q_s}{2}$
régi	$\text{Fe}_{72,5}\text{Pt}_{27,7}$	82 (4)	11	10
új		87 (4)	3	0
	$\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$	61,0 (3,5)	5	0

egység: mrad

Ezekhez teljesen hasonló módon számolt adatok találhatók a VI. táblázatban a 240 keV-es nívóra. Megfigyelhetjük, hogy  $\varepsilon$  és  $\frac{q_s}{2}$  kompenzációja még mindig jelentős, de már nem teljes.

A 211 keV-es nívóra kapott  $Q$  adatok kiértékelése elvileg azonos módon ment a másik két esettel, de némi komplikációt jelentett a közvetett ág jelenléte a nyalábeltérülési korrekcióval súlyosbítva.

Ebben az esetben

$$q' = \frac{1 - \frac{Q}{1 - 2\sqrt{2} s \left( \frac{1}{r_X} + \frac{1}{r_Y} \right)}}{2b_d \left( \alpha + \frac{b_i}{b_d} \cdot \frac{\beta}{1+y^2} \right)} =$$

$$= \frac{x - 2\varepsilon(1 + Hx) + H}{1 + x^2 + b_d \left( \alpha + \frac{b_i}{b_d} \cdot \frac{\beta}{1+y^2} \right) [x - 2\varepsilon(1 - Hx)] + \frac{\beta b_i y}{1+y^2}} \quad (7)$$

itt

$$H = \frac{\frac{\beta b_i y}{1+y^2}}{b_d \left( \alpha + \frac{b_i}{b_d} \cdot \frac{\beta}{1+y^2} \right)}; \quad y = 2(\omega\tau)_{240 \text{ keV}}$$



$b_i$  és  $\beta$ , ill.  $b_d$  és  $\alpha$  az indirekt, ill. direkt ágból eredő 211 keV-es  $\gamma$ -sugarak  $b_2$  szögeloszlási együtthatója és súlyfaktora.

A VIII. táblázat adatait tekintve fel kell hívni a figyelmet az egyes paralelek statisztikus hibán belüli egyezésére, és ezen túl is az egyes nivókra képezett  $\omega\tau_{27\%}/\omega\tau_{50\%}=R(E)$  viszonyszámok azonos voltára. Ez nem csak a mérések és a korrekció megbízhatóságát indikálják, hanem azt is, hogy valóban nincs más különbség.

## VI. TÁBLÁZAT

A  $^{195}\text{Pt}$  mag 240 keV-es nivójára kapott értékek  
és azok nyalábeltérülési korrekciója

mágnes	ötvözet	$\omega\tau$	$\varepsilon$	$\frac{q_s}{2}$
régi	$\text{Fe}_{72,5}\text{Pt}_{27,5}$	151 (20)	11	13
új		148 (85)	3	0
	$\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$	110 (19)	5	0

egység: mradián

A VII. táblázat tanúsága szerint a  $\frac{q_s}{2}$  már háromszorosa  $\varepsilon$ -nak.

## VII. TÁBLÁZAT

A  $^{195}\text{Pt}$  mag 211 keV-es nivójára kapott eredmények  
és azok nyalábeltérülési korrekciója

mágnes	ötvözet	$\omega\tau$	$\varepsilon$	$\frac{q_s}{2}$
régi	$\text{Fe}_{72,5}\text{Pt}_{27,5}$	48 (19)	11	31
új		68 (22)	3	0
	$\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$	38 (13)	5	0

egység: mradián

## VIII. TÁBLÁZAT

A mért  $\omega\tau$  értékek összesítése és viszonyai

	$\omega\tau_{27,5\%}$	$\omega\tau_{50\%}$	$R = \frac{\omega\tau_{27,5}}{\omega\tau_{50}}$
$^{194}\text{Pt}$ (329 keV)	84,5 (28)	61,0 (5,7)	1,39 (9)
$^{195}\text{Pt}$ (240 keV)	151 (19)	110 (19)	1,37 (29)
$^{195}\text{Pt}$ (211 keV)	58 (14)	38 (13)	1,55 (65)

egység: mradián

ség a 27-es 50 at%-os ötvözzel végzett mérés között. mint a perturbáló mágneses tér intenzitásának az ötvözési aránytól függő változása.

Az  $\omega\tau$  értékek némi eltérést mutatnak a korábban közölt (Varga és mások, 1969) 27 at%-os ötvözzel és az első mágnessel végzett mérési eredményektől. A 329 keV-es nívón kapott  $\omega\tau$  most azért tér el az akkor megadottól, mert a  $q$ -nak az  $x$ -ben magasabb rendű tagjai ezúttal nem lettek elhanyagolva. A 240 keV-es nívó  $\omega\tau$ -ja a nyalábeltérülés figyelembevételé miatt változott meg. Míg azonban a fenti válto-

zások a statisztikus hibák határain belül vannak, addig a 211-es nívóra kapott új  $\omega\tau$  éppen a fele a korábbi értéknek. Ennek a változásnak az oka kettős. Az időközben ismertessé vált  $5/2^- - 29 \text{ keV} - 3/2^-$  átmenet figyelembevételé radikális hatású volt az eredményt illetően. Gyakorlatilag innen ered a változás zöme, kb. 30 mrad. Bár az idézett cikkben (Varga és mások, 1969) is található korrekció erre az átmenetre, de azzal a feltevéssel, hogy a szög-

eloszlása izotrop, ezért a részarányának megfelelő korrekcióval növelte az  $(\omega\tau)_{211}$ -et. Az a 19 mrad, ami a nyalábeltérülés következménye már a statisztikus hibahatáron (ez itt elég nagy) belül esik.

A  $^{195}\text{Pt}$  méréseket megismételték Kugel és mások (1969) 35 MeV-es  $^{16}\text{O}$  ionokkal történő Coulomb gerjesztést alkalmazva.  $\omega\tau$  adataikat az általuk tapasztalt 17,7 MGausspsec.-nek megfelelő impulzusprecesszióval korrigálva nagyon jó egyezésben vannak Varga és mások (1969) eredményeivel. Természetesen a Schöneberg (1967) féle elágazásról még nekik sem volt tudomásuk, így a 211 keV-re kapott  $\omega\tau$  csak ennek figyelembevételé után egyezhet meg a most közöltekkel.

A  $^{194}\text{Pt}$  mag 329 keV-es nívóján mért  $(\omega\tau)_{27\%}$  és  $(\omega\tau)_{50\%}$  adatok alkalmasak az utóbbi esetben aktuális hiperfinom tér értékének meghatározására. R. Beraud és mások (1968) dolgozatában nagyon kimerítő összefoglalás található az alacsony hőmérsékletű híg FePt ötvözetben mért  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})_0$  értékekről. Ezek az adatok a IX. táblázatban láthatók. Eredményük szerint

$$H_{\text{Pt}}(\text{Fe})_0 = -1270 \pm 25(2\%) \text{ kGauss.}$$

Az ugyancsak híg ötvözetben mért statikus  $\omega\tau$  értékek összefoglalása megtalálható Cameron és társai (1970) dolgozatában, melyet mi a X. táblázatban idézünk. Eszerint a jelenleg érvényes  $\omega\tau$  „világátlag”  $89 \pm 3(3,4\%)$  mrad. Igaz ugyan, hogy ez az érték szobahőmérsékleti mérések eredménye, azonban a híg ötvözet Curie-pontja olyan magas, hogy a 290°-os hőmérsékleti korrekciónak nincs gyakorlati szerepe.

A fenti  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})_0$  és  $\omega\tau$  ötvözeti adatokat összevetve a mi 329 keV-es nívóra kapott  $\omega\tau$  eredményünkkel

$$H_{\text{Pt}_{27}}(\text{Fe}_{73}) = -1,210 \pm 0,062 (5,2\%) \text{ MGauss}$$

és

$$H_{\text{Pt}_{50}}(\text{Fe}_{50}) = -0,870 \pm 0,060 (6,9\%) \text{ MGauss}$$

(8)



adódik a Pt magok helyén található hiperfinom tér értékére, az esetünkben érvényes hőmérsékleten a két ötvözesi arányú ötvözetben.

A (8)-ban adott értékek hőmérsékleti korrekcióját illetően az a helyzet, hogy a bombázó nyaláb kb.  $1,5 \text{ mm}^2$ -nyi felületre érkezett, ennek afooltnak a közepétől kb.  $2 \sim 3 \text{ mm}$ -re  $120^\circ\text{K}$ -t találtunk, becslésünk szerint a forrás helyén makroszkopikusan  $150^\circ\text{K}$ -t vehetünk fel. Mikroszkopikusan nézve a dolgot, valószínűleg helyes az az elgondolás, hogy a bombázó protonok inkább a mélyebb rétegeket fűtik. Ott ahol a Pt magok Coulombgerjesztése számottevő, a  $dE/dx$  még nagyon kicsi.

A 27 at%-os ötvözetünk mágneses tulajdonságait *Tarnóczy* (1967) vizsgálta. Eszerint melegítve  $400^\circ\text{C}$ -nál veszti el ferromágnesességét, de lehűtve csak  $80^\circ\text{C}$ -nál nyeri vissza. Ez azért van, mert a 25 at% Pt tartalom feletti rész szobahőmérséklet felett rendezetlen  $\alpha$ -fázist alkot, mely a Curie-pontot lenyomja (*Krén és Szabó*, 1965). *Pramila és Grodzins* (1968) szerint a vas—platina ötvözetben a Pt mag helyén mérhető mágneses térnek a hőmérséklet-függése összhangban van a Weiss-féle mágnesezési görbével, ezért a vas görbéjével és a  $80^\circ\text{C}$  Curie-ponttal számolva mintegy 50 kGauss-szal korrigálnunk kell a  $H_{\text{Pt}_{27}}(\text{Fe}_{73})_{150^\circ\text{K}}$  mérési eredményünket.

$$H_{\text{Pt}_{27}}(\text{Fe}_{73})_{0^\circ\text{K}} = -1,260 \pm 0,062 \text{ (4,9\%)} \text{ MGauss.} \quad (9)$$

Az  $\text{Fe}_{50}\text{Pt}_{50}$  összetételű ötvözetre érvényes Curie-pont nem áll rendelkezésünkre, ezért itt a hőfok-korrekciót nem tudjuk elvégezni.

A tér ötvözesi aránytól való függésére két mérés jelent meg az irodalomban, melyek a miénkhez közelálló összetételű ötvözetet vizsgáltak. Egyik *Buyrn és társainak* (1967) a mérése, akik 3, 10, 25, 30 és 50 at% Pt tartalmú FePt ötvözeteket vizsgáltak Mössbauer-módszerrel. Eredményeik szerint az első három esetben egyaránt  $1,26 \pm 0,10 \text{ MGauss}$  tértősséget találtak, és enyhe, de nem szignifikáns emelkedést észleltek a 30%-os ötvözetnél ( $1,38 \pm 0,12 \text{ MGauss}$ ).

Az irodalom másik  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe}_{70})$  értéke *Buyrn* (1966) doktori dolgozatában található; ő 11%-os hibán belül megkapta a híg ötvözetben érvényes  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})$  értéket.

A két 30 at% Pt-t tartalmazó ötvözetben végzett mérés átlaga

$$H_{\text{Pt}_{30}}(\text{Fe}_{70}) = 1,33 \pm 0,09 \text{ MGauss.}$$

Ez a  $4^\circ\text{K}$  hőmérsékleten mért adat kiváló egyezésben van a mi hőfokra korrigált eredményünkkel.

A  $H_{\text{Pt}_{50}}(\text{Fe}_{50})_{150^\circ}$ -ra kapott adatunk összevetése *Buyrn és társainak* (1967) eredményével nem teljes értékű, mert egyrészt ők nem adtak meg hibahatárokat, másrészt Curie-pont adat hiányában nem áll módunkban hőfok korrekciót alkalmazni.

Ki kell hangsúlyozni annak jelentőségét, hogy a 27 at%-os ötvözetben talált  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})$  egyezése milyen kifogástalan az irodalom „statikus” adataival. Ez nem

## X. TÁBLÁZAT

A  $^{194}\text{Pt}$  első gerjesztett nivójának irodalmi  $\omega\tau$  adatai, híg FePt ötvözetben, szobahőmérsékleten mérve

$\omega\tau/\text{mrad.}$	Szerző
$87 \pm 4$	D. B. Kenyon és mások (1970)
$92 \pm 7$	L. Keszthelyi és mások (1965)
$99 \pm 9$	Y. K. Agarwal és mások (1966)
$89 \pm 3$	átlag

csak a mérés jóságát húzza alá, hanem a módszerét is, frappáns választ adva egyrészt a polarizált elektronokéhoz képest kis sebességű visszalökéssel járó Coulomb-gerjesztés ilyen irányú használhatóságát illető kétkedésre, másrészt ékesen demonstrálja a lefékeződő Pt atomoknak substitutionális beépülését a féknyom végén.

A 329 keV-es nivóra végzett mérésünk szolgáltatatta (8) alatti térértékeket felhasználhatjuk a 240 és 211 keV-es  $^{195}\text{Pt}$  nivók  $g$ -faktorának a meghatározására;

# XI. TÁBLÁZAT

A  $^{195}\text{Pt}$  alacsonyenergiájú gerjesztett állapotainak  $g$ -faktorai

$E/\text{keV}$	$I$	$g_{\text{exp}}$	$g^5$	$g^6$	Schmidt-limit
0	1/2	1,21 <sup>1</sup>	1,28		+1,27 -3,82
99	3/2	-0,39 (8) <sup>2</sup>	-1,07	-0,05	+0,76 -1,27
130	5/2	0,324 (72) <sup>3</sup>	0,64	0,35	+0,54 -0,76
211	3/2	0,104 (21) <sup>4</sup>	0,31	-0,02	+0,76 -1,27
240	5/2	0,149 (19) <sup>4</sup>	0,43	0,37	+0,54 -0,76

<sup>1</sup> Proctor és Yu (1951)

<sup>2</sup> A. Buyrn és mások (1967).

<sup>3</sup> D. Walcher (1971).

<sup>4</sup> Jelen dolgozat.

<sup>5</sup> M. Csürös és Z. Zámori (1968).

<sup>6</sup> A. Gal (1966).

előbb azonban tisztáznunk kell a (III. 13.) képletben előforduló  $\tau$  magnívó élettartamok értékét.

A 240 keV-es nivó élettartamát tekintve változott az irodalom álláspontja a Varga és mások (1969) cikk megjelenése óta. Az újabban elfogadott érték  $\tau_{240} = 175 \pm 14(8\%)$  psec, melyet három mérés átlagából nyertünk: Brutonék munkájából (1970), a már idézett Kugel (1969) cikkből és Grodzinséknak a Schönebergék (1967) elágazási arányával korrigált eredményéből.

Az 50, ill. 27 at%-os ötvözetben kapott  $\omega\tau$ -val és az ott érvényes belső térrel kapott  $g$ -faktorok, azok átlagai a XI. táblázatban van összefoglalva.

Ugyanitt található a 211 keV-es nivó  $g$ -faktora, az előzőhöz hasonló részletezésben. Ennek értékét a Blaugrund és mások (1965) cikkeiben található  $\tau = 97 \pm 7$  psec-kel számoltuk.

Ugyancsak látható a XI. táblázatban a nivók  $g$ -faktorára vonatkozó elméleti predikció is, de nem csak az általunk vizsgált esetre, hanem a  $^{195}\text{Pt}$  alsó  $3/2^-$  és  $5/2^-$  impulzusmomentumú dublettjére is. A korábbi kísérleti vizsgálatok (McGowan és Stelson, 1959) ugyanis azt mutatták, hogy ez a négy nivó hordozza a  $^{194}\text{Pt}$ , ill.  $^{196}\text{Pt}$   $2^+$ -os nivóinak kvadrupól erősségét, tehát ezek a nivók felfoghatók az alapállapot konfigurációnak a kvadrupól gerjesztéseként.



Az összeg-szabály szerint ugyanis a páros-páros törzs kvadrupól gerjesztése  $B(E2)$ -jének (redukált átmeneti valószínűségének) ki kell adódnia a ráépülő páratlan mag multiplettjeinek a  $\Sigma B(E2)$ -jéből. Mégis a szituáció sokkal komplikáltabb, mivel a törzs egy-fonon gerjesztése csak az egyik dublett kollektív jellegét indokolná. Valóban, Kumar és Barangernak (1968) a maradék kölcsönhatások „pairing-plus-quadrupol”-modell szerint történő figyelembevételével végzett nívóséma-, elektro-mágneses momentum- és deformáció-számításai megerősítik a Pt magok átmeneti voltát a vibrációs és rotációs jelleg között, az elsőhöz erősen közelebbi helyzetben.

Mivel mind a 194-es, mind a 196-os Pt izotópban csak 300 keV-vel van feljebb a második  $2^+$ -os vibrációs állapot, mint az első, ezért Gál (1966) a nívók mágneses momentumát célzó számításában azt feltételezte, hogy a 300 keV-es távolság még jobban lecsökkenhet a  $^{195}\text{Pt}$  mag  $p$  1/2-es alapállapotú neutronja jelenlétének következtében. Továbbá, mivel a dipol-dipol kölcsönhatásnak nincs lényeges szerepe a vibrációs típusú törzs-állapotok közötti kölcsönhatásban, ezért Gál (1966) a  $2^+$  és  $2^+$  állapotok keveredéséhez még további egyrészecske konfigurációkat is bevezetett (becslései szerint azonban ezek csak pár százalék erejéig vesznek részt a leírásban). Az egyes konfigurációk súlyfaktorait a redukált átmeneti valószínűségekkel hozta kapcsolatba de Shalit (1961) munkája alapján; az így kapott hullámfüggvényből kiadódó mágneses momentum értékek a XI. táblázatban találhatók meg.

A  $^{195}\text{Pt}$  mag szóban forgó négy gerjesztett állapotának a mágneses momentumát leírandó számításokat végzett még Csűrös és Zámori 1968-ban a „közbenső csatolású” modell alapján, mellyel eredményesen leírták már a  $^{53}\text{Cr}$  és  $^{55}\text{Fe}$  magok nívórendszerét és elektromágneses tulajdonságait (Csűrös és mások, 1971). E számítások első lépéseként a  $^{195}\text{Pt}$  alacsony energiájú nívóinak sémáját akarták megkapni oly módon, hogy a páros-páros tömegszámú gerjesztett törzshöz csatolták a külső páratlan neutron mozgását. Mivel azonban nem sikerült olyan erős csatolási állandót találni, mellyel a nívóséma reprodukálódott volna, ezért a fordított eljárást választva a  $^{195}\text{Pt}$  adott nívósortrendjéből kiindulva keresték meg az alkalmas csatolási állandót. Ez csak olyan fononállapotok mellett volt lehetséges, melyek eltérőek a páros-páros szomszédok gerjesztett állapotaitól; ez azonban elképzelhető, hiszen a törzs gerjesztett állapotai tényleg perturbálódhatnak a külső részecske hatására. Az így kapott hullámfüggvényekkel számolt mágneses momentumok szintén a XI. táblázatban találhatók.

A mért mennyiségeket összevetve a számolt adatokkal megállapíthatjuk, hogy a Csűrös—Zámori (1971)-féle számítás adja vissza jobban a valóságot a Gál (1966)-félével szemben, bár az ugyancsak a XI. táblázatban adott Schmidt-limitet az előbbi egy esetben (130 keV,  $3/2^-$ ) túllépi, ami azért mindenképpen arra mutat, hogy a leírásnak komoly fogyatékoságai vannak.

## VI. FEJEZET

### Összefoglalás

A dolgozat ismerteti a  $^{195}\text{Pt}$  negyedik és ötödik gerjesztett állapota  $g$ -faktorának a megmérését.

A mérés új módszerrel történt, amennyiben a vasba ágyazott Pt magok kis visszalökési energiájú Coulomb-gerjesztéssel előállított gerjesztett állapotait a hiperfinom eredetű  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})$  mágneses tér perturbálta, a le bomlás szögeloszlásának a megváltozása az ugyancsak új (mondjuk így) „ $Q^2$ -módszer”-rel lett megmérve.

A  $^{194}\text{Pt}$  mag 329 keV-es nívójára kapott  $\omega\tau$  a 27,5 at% Pt-t tartalmazó ötvözet esetében a módszer használhatóságát bizonyítja, amennyiben statisztikus hibán belüli egyezés adódott az irodalomban található azonos összetételű ötvözetten statikus módon mért  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})$  adatokkal. Az 50 at%-os ötvözet esetében kapott  $H_{\text{Pt}}(\text{Fe})$  szilárdtestfizikai szempontból hasznos új eredmény.

A  $^{194}\text{Pt}$  mag 329 keV-es, továbbá a  $^{195}\text{Pt}$  mag 211 és 240 keV-es sugárzásának a Coulomb-gerjesztés után kapott szögeloszlása jó egyezésben van az elméletileg várt, és a mások által kísérletileg kapott értékekkel; a 211 keV-es sugárzás esetében kapott  $\delta$  csekély javítását adja a korábbi irodalmi értéknek.

A Varga és mások (1969) dolgozatában közölt 211 és 240 keV-es nívók g-faktorait további mérésekkel pontosabbá téve, a nyalábeltérülési korrekcióval, továbbá a 240 keV-es nívó újabban megismert elágazási arányával és élettartamával kiigazítva kaptuk meg. Bár a nyalábeltérülés egyik-másik vonatkozására van utalás az irodalomban, a fenti alapossággal történő figyelembevételét a dolgozat nyújtja.

A Varga és mások (1969) cikk g-faktor adatait egyetértésben reprodukálta Kugel és mások (1969) mérése, mely alátámasztja a mérések megbízhatóságát és feltételezhetően arra készíti majd az elméleti kutatókat, hogy az elméleti és kísérleti eredmények eltérését újabb vizsgálatokkal igyekezzenek megszüntetni.

### Köszönetnyilvánítás

A dolgozatban ismertetett vizsgálat nagyon sokrétű, számos tényező kifogástalan összehangolását kívánta meg. Az ötvözeteket a Szilárdtestfizikai Osztály adta, a gyorsítót a Gyorsító Laboratórium üzemeltetői működtették, az elektronikának és ebben főként az analízatornak az Elektronikus Főosztály Számológép Alkalmazás Technikai csoportja viselte gondját, a spektrumok dekomponálása a Számítástechnikai Osztályon történt. Mindenekelőtt köszönetet kívánok mondani a fenti osztályok illetékes dolgozóinak segítőkészségükért, a felmerült problémák gyors megoldásáért.

Köszönetet mondok odaadó munkájukért a mérési ügyeletben résztvevő kolléganőknek és kollégáknak, a mechanikai munkák mindig gyors és pontos elvégzéséért Cserge Lajos kartársnak.

Köszönet illeti meg Pócs Lajos kollégát az MPN1 dekomponáló program elkészítéséért, rendelkezésemre bocsátásáért, és a használat közben felmerült problémákban való készséges segítségért. Ugyancsak köszönöm Dr. Szőkefalvi-Nagy Zoltán kollégámnak a számítógépi munkák odaadó lebonyolítását és a sok értékes diszkussziót. Külön köszönetet mondok Keszthelyi Lajosnak, a fizikai tudományok doktorának a probléma felvetéséért, az értékes diszkusszióért, kritikai megjegyzéseire, a kiváló munkafeltételek biztosításáért, s a munkálatok haladása iránt tanúsított állandó érdeklődéséért.

Köszönettel tartozom Bódi Tiborné kolléganőnek a gondos gépelésért és Lipsicz Györgyi kolléganőnek a rajzok elkészítéséért.

### IRODALOM

- A. Abragam, R. V. Pound, Phys. Rev. 92, 943, 1953.  
 H. Aeppli, H. Albers-Schöneberg, A. S. Bishop, H. Frauenfelder, E. Heer, Phys. Rev. 84, 360, 1951.  
 Y. K. Agarwal, C. V. Baba, S. K. Bhattacharjee, Nucl. Phys. 79, 1966, 467, 1966.  
 D. Agresti, E. Krankelheit and B. Persson, Phys. Rev. 155, 1339, 1967.  
 K. Alder, A. Bohr, T. Huus, B. Mottelson and A. Winther, Rev. Mod. Phys. 28, 432, 1956.  
 H. Appel, W. Mayer, Nucl. Phys. 43, 393, 1963.  
 A. Arima, H. Horie, Progr. Theoret. Phys. 11, 509, 1954.  
 M. Atac, P. Debrunner and H. Frauenfelder, Phys. Rev. Lett. 21, 699, 1966.  
 M. Baranger, K. Kumar, Nucl. Phys. A110, 490—555, 1968.  
 Gy. Bencze, J. Zimányi, Acta Phys. Hung. 20, 209, 1966.



- K. Beraud, L. Berkes, J. Danieri, Michele Lévy, G. Marest, R. Rougny, H. Betnas, D. Spanjaard, *Hyperfine Structure and Nuclear Radiation* ed. by E. Matthias, D. A. Shirley, North-Holl. P. C. Amsterdam, 1968.
- E. M. Bernstein, H. W. Lewis, *Phys. Rev.* 100, 1345, 1955.
- L. C. Biedernharn, P. J. Brussard, *Coulomb Excitation*. Clarendon Press. Oxford, 1965.
- L. C. Biedernharn, M. E. Rose, *Rev. Mod. Phys.* 25, 729, 1953.
- J. M. Blatt, V. F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1952.
- A. E. Blaugrund, Y. Dar, G. Goldring, J. Hess, J. Plessner, *Nucl. Phys.* 69, 423, 1965.
- R. J. Blin Stoye, *Theories of Nuclear Moments*. Oxford University Press, London, 1957.
- Z. Bochnacki, S. Ogaza, *Nucl. Phys.* 69, 186, 1965.
- Z. Bochnacki, S. Ogaza, *Hyperfine Structure and Nuclear Radiations*, ed. by E. Matthias, Shirley, North-Holl. P. C. Amsterdam, 1968.
- A. Bohr, B. R. Mottelson, *Lectures on Nuclear Structure and Energy Levels* Nordita, Copenhagen, 1963.
- R. R. Borchers, B. Herskind, J. D. Bronson, L. Grodzins, R. Kalish, D. E. Murnick, *Phys. Rev. Lett.* 20, 424, 1968.
- E. L. Brady, M. Deutsch, *Phys. Rev.* 78, 558, 1950.
- E. J. Burton, J. A. Cameron, A. W. Gibb, D. B. Kenyon, L. Keszthelyi, *Nucl. Phys.* A152, 495, 1970.
- A. Buyrn, *Doktori disszertáció*, MIT preprint, 1966.
- A. Buyrn és L. Grodzins, *MIT Progress Report*, N° 142, 2098, 1964.
- A. Buyrn, L. Grodzins, N. A. Blum, J. Wulff, *Phys. Rev.* 163, 286, 1967.
- M. Csűrös, J. A. Cameron, Z. Zámori, *Can. J. Phys.*-ben megjelenés alatt.
- M. Csűrös, Z. Zámori, *Magánközlemény*, 1968.
- E. Daniel, J. Friedel, *J. Phys. Chem. Solids* 24 1601, 1963.
- J. De Boer, J. D. Rogers, *Phys. Lett.* 3, 304, 1963.
- A. De Shalit, *Phys. Rev.* 122 1530, 1961.
- A. De Shalit, *Phys. Lett.* 15, 170, 1965.
- S. D. Drell, J. D. Walecka, *Phys. Rev.* 120 1069, 1960.
- B. Dreyfus, P. Stetsenko, D. Thoulouze, *Phys. Lett.* 24A, 459, 1967.
- C. Erginsoy, G. H. Vineyard, A. Englert, *Phys. Rev.* 133 A595, 1964.
- E. Fermi, *Z. Phys.* 60, 320, 1930.
- E. Fermi, E. Segre, *Z. Phys.* 82, 729, 1933.
- N. Freed, L. S. Kisslinger, *Nucl. Phys.* 25, 611, 1961.
- A. J. Freeman, B. Bagus, R. E. Watson, *Colloq. Intern. Centre Natl-Rech. Sci.* N° 164, 1966, Paris.
- A. Gal, *Phys. Lett.* 20, 414, 1966.
- W. Greiner, *Nucl. Phys.* 80, 417, 1966.
- G. Goldring, R. Kalish, H. Spehl, *Nucl. Phys.* 80, 33, 1966.
- L. Grodzins, R. R. Borchers, G. B. Hagemann, *Nucl. Phys.* 88, 474, 1966.
- L. G. rodzins, R. Kalish, D. Murnick, R. J. Van de Graaff, F. Chamasa, P. H. Rose, *Phys. Rev. Lett.* 24B 282, 1961.
- S. S. Hanna, J. Heberle, C. Littlejohn, G. J. Perlov, R. S. Preston, D. H. Vincent, *Phys. Rev. Lett.* 4 14, 1960.
- S. S. Hanna, J. Heberle, G. J. Perlov, R. S. Preston, D. H. Vincent, *Phys. Rev. Lett.* 4, 513, 1960.
- G. M. Heestand, R. R. Borchers, R. Kalish, L. Grodzins, *Bull. Ann. Phys. Soc.* 13, 666, 1968.
- R. Kalish, W. J. Kossler, *Phys. Rev. Lett.* 20, 271, 1968.
- D. B. Kenyon, L. Keszthelyi, J. A. Cameron, *Can. J. Phys.* 48, 2730, 1970.
- L. Keszthelyi, *magánközlés*, 1970.
- L. Keszthelyi, I. Berkes, I. Dézsi, B. Molnár, L. Pócs, *Phys. Lett.* 8, 195, 1964.
- L. Keszthelyi, I. Berkes, I. Dézsi, L. Pócs, *Nucl. Phys.* 71, 662, 1965.
- G. K. Khutsishvili, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* 29, 894, 1955.
- L. S. Kisslinger, R. Sorensen, *Rev. Mod. Phys.* 35, 853, 1963.
- C. Kittel, *Bevezetés a szilárdtestfizikába*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1966.
- M. Kontani, J. Itok, *J. Phys. Soc. Japan* 22, 345, 1967.
- H. J. Körner, J. Braunsfurth, H. F. Neseemann, S. J. Skorka, B. Zeitnitz, *Compt. Rend. Congr. Intern. Phys. Nucl. Paris*, 1964. II. 478.
- H. J. Körner, U. Ortabasi, *Nucl. Phys.* 70, 28, 1965.
- E. Krén, P. Szabó, *Solid State Com.* 3, 371, 1965.
- H. W. Kugel, R. R. Borchers, R. Kalish, *Nucl. Phys.* A137, 500, 1969.

- K. Kumar, M. Baranger, Nucl. Phys. A122, 273, 1968.  
 J. Linhard, Proc. Roy. Soc. A311, 11, 1969.  
 E. Matthias, Hyperfine Interactions. Eds. A. J. Freeman, R. B. Frankel, Academic Press, London, 1967.  
 F. K. McGowan, P. H. Stelson, Phys. Rev. 116, 154, 1959.  
 F. R. Metzger, Nucl. Phys. 27, 612, 1961.  
 D. E. Murnick, Hyperfine Interactions, ed. by. A. Freeman, R. B. Frankel, Academic Press, New York, 1967, p. 637.  
 D. E. Murnick, I. R. McDonald, R. R. Borchers, G. Heestand, B. Herskind, Conference on Ion Implantation and Hyperfine Interactions, London, 1968.  
 J. Murray, T. A. McMath, J. A. Cameron, Can. J. Phys. 45, 1813, 1967.  
 S. G. Nilsson, O. Prior, Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat. Phys. Medd. 32, N° 16, 1961.  
 H. Noya, A. Arima, H. Horie, Progr. Theoret. Phys. Suppl. 8, 33, 1958.  
 G. Pramila, L. Grodzins, Hyperfine Structure and Nuclear Radiation ed. by. E. Matthias and D. A. Shirley. North-Holl. P. C. Amsterdam, 1968, p. 478.  
 O. Prior, F. Boehm, S. G. Nilsson, Nucl. Phys. A110, 257, (1968).  
 W. G. Proctor and F. C. Yu, Phys. Rev. 81, 20, 1951.  
 E. T. Ritter, P. W. Keaton, Y. K. Lee, R. R. Stevens, J. C. Walker, Phys. Rev. 154, 287, 1967.  
 B. N. Samojlov, V. V. Sklyarevskij, E. P. Stepanov, Zh. Eksperim i Teor. Fiz. 36, 644, 1959.  
 T. Schmidt, Z. Phys. 106, 358, 1937.  
 H. Schmidt, J. Morgenstern, H. J. Körner, J. Braunsfurth, S. J. Skorka, Phys. Lett. 24B, 457, 1967.  
 R. Schöneberg, D. Gföller, A. Flammersfeld, Z. Phys. 203, 453, 1967.  
 K. D. Sevier, Nucl. Phys. 61, 601, 1965.  
 D. A. Shirley, Ann. Rev. Nucl. Sci. 16, 89, 1966.  
 D. A. Shirley, S. S. Rosenblum, E. Matthias, Phys. Rev. 170, 363, 1968.  
 D. A. Shirley, G. A. Westerbarger, Phys. Rev. 138, A170, 1965.  
 L. A. Sliv, L. M. Band, in Gamma Rays ed. by. L. A. Sliv. Academy of Sciences of the USSR. Moscow—Leningrad 1961.  
 R. M. Steffen, Summary and Conclusions. Perturbed Angular Correlations, ed. by. E. Karlsson, E. Matthias, K. Siegbahn, North-Holland P. C. Amsterdam, 1964.  
 R. M. Steffen, H. Franenfelder, Perturbed Angular Correlations ed. by. E. Karlsson, E. Matthias, K. Siegbahn, North-Holland P. C. Amsterdam, 1964.  
 P. H. Stelson, F. K. McGowan, Phys. Rev. 99, 112, 1955.  
 K. Sugimoto, K. Nakai, A. Mizolencki, Phys. Rev. 134, B639, 1964.  
 T. Tarnóczy, magánközlemény, 1967.  
 L. Varga, I. Demeter, L. Keszthelyi, Z. Szökefalvi-Nagy, Z. Zámori, Phys. Rev. 177, 1783, 1969.  
 L. Varga, S. Koicki, Phys. Lett. 30A, 312, 1969.  
 D. Walcher, Magfizikai konferencia, Würzburg, 1971.  
 R. E. Watson, A. J. Freeman, Phys. Rev. 123, 2027, 1961.  
 R. E. Watson, A. J. Freeman, Hyperfine Interaction ed. by. A. J. Freeman, R. B. Frankel, Academic Press, New York, 1967.



# A VOLFRÁM NYOMSZENNYEZŐINEK ÉS RÁCSHIBÁINAK VIZSGÁLATA ELEKTROMOS TRANSPORTTULAJDONSÁGOK SEGÍTSÉGÉVEL\*

URAY LÁSZLÓ

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A pormetallurgiai volfrám huzalok és lámpaspirálok nyomszennyezőinek és rácshibáinak tanulmányozására a dolgozat az elektromos transporttulajdonságok mérését választotta. Az elektromos ellenállás és termofeszültség egyidejű mérésével a különböző oldott szennyezőket és az egyes rácshiba-fajtákat minőségileg is szét lehetett választani és ennek alapján részletesebben foglalkozik a dolgozat a kb. 50 súly ppm mennyiségben jelenlevő oldott vas mennyiségének, kipárolgásának és eloszlásának tanulmányozásával. A többletellenállás hőmérsékletfüggésének vizsgálata felhívta a figyelmet arra, hogy a magas olvadáspontú fémekben gyakran van jelentős lokális szennyező inhomogenitás.

## I.

### Bevezetés

A modern technikában egyre gyakrabban nyernek alkalmazást a főleg tércentrált köbös szerkezettel rendelkező magas olvadáspontú átmeneti fémek, ezért ezek tulajdonságai egyre gyakrabban képezik tudományos kutatások tárgyát. A volfrám, mint a legmagasabb olvadáspontú átmeneti fém különösen fontos szerepet játszik közöttük az izzólámpákban betöltött kiváltságos szerepe miatt, és sok más újabb alkalmazásnál is. A jelen dolgozat a pormetallurgiai volfrámon végzett kutatásaink eredményeit próbálja áttekinteni. A vizsgálatok módszere elsősorban az elektromos tulajdonságok mérése volt, és velük a volfrám szennyezőinek és rácshibáinak viselkedését, valamint ezeknek a volfrám tulajdonságaira gyakorolt hatásait tanulmányoztuk. A továbbiakban röviden tekintsük még át, hogy ilyen típusú vizsgálatoktól volfrámban és más fémekben milyen jellegű problémák megoldására számíthatunk.

A rácshibák tanulmányozására jól bevált és gyakran alkalmazott módszer az alacsony hőmérsékletű elektromos ellenállás mérése. Különböző hőmérsékleteken és ideig történő hőkezelésekkel összekapcsolva ez lehetőséget nyújt az egyes rácshiba típusok szétválasztására is, hiszen a különböző rácshibák általában különböző aktiválási energiával mozognak, és eltérő kinetikával tűnnek el. Nehezen alkalmazhatók azonban ezek a mérések pl. annak eldöntésére, hogy egy adott hőkezelési lépcsőben egy vagy többféle rácshiba tűnik-e el a fémről. Ilyen kérdést vet fel a tércentrált köbös fémek III. hőkezelési lépcsőjének az eredete. Ez ugyanis V, Nb és Ta-ban csak szennyezők hatására jön létre, Mo és W-ban viszont önálló lépcső, amelyet

\* Érkezett 1975. márc. 15.

valószínűleg saját-intersticiósok kimenetele okoz [1, 2], bár pl. széntartalmú mintánál a szén kiválása is hasonló lépcsőt okoz [3].

Az elektromos ellenállás jól felhasználható a fémekben oldott szennyezők „összes” mennyiségének megállapítására, valamint olyan változások tanulmányozására, amikor a szennyező a hőkezelések során oldatba megy, vagy kicsapódik (ilyen pl. a W—C rendszer viselkedése is). A volfrám szubsztitúciós oldott szennyezői azonban általában nem precipitálnak, hanem magas hőmérsékleten kipárolognak. A kipárolgás során azonban nem különböztethetők meg egymástól, mert ezen szennyezők mozgása azonos mechanizmussal történik, és a szubsztitúciós szennyezők diffúziós állandója csak kevéssel tér el az alapfém öndiffúziós állandójától.

Eddig csak kevéssé kihasznált lehetőséget kínál az egyes szennyezőfajták szétválasztására, ha egyszerre két vagy több olyan módszert is alkalmazunk, amelyeket a különböző szennyezők és rácshibák erősen különböző mértékben befolyásolnak. Ebből a szempontból nem lenne túl jó választás pl. az elektromos és hővezetőképességek együttes mérése, mert mint *Kierspe* [4] méréseiből látható, a réz oldott szennyezőire a két vezetőképesség hányadosa az egyes szennyezőkre közel azonos. Ennek oka a hővezetőképesség döntő részét alkotó elektronhővezetés, valamint az elektromos vezetőképesség között fennálló Wiedemann—Franz-törvény. Igen jónak bizonyult viszont az elektromos ellenállás és a termofeszültség választása két paraméterként, ezek ugyanis mindketten igen érzékenyek a fémek oldott szennyezőire, és amellet specifikus érzékenyséjük is igen különböző lehet az egyes szennyező-fajtákra. Az elektromos ellenállás és a termofeszültség között a Nordheim—Gorter-szabály [5] állapít meg összefüggést azáltal, hogy megadja az egyes szennyezőkre jellemző ún. karakterisztikus termofeszültséget. Ez a karakterisztikus termofeszültség nem függ a szennyező koncentrációjától, de különböző típusú szennyezőkre erősen különböző lehet. Főleg a mágneses momentummal rendelkező szennyező atomok adnak nagy karakterisztikus termofeszültségeket, így a módszer elsősorban ezeknek a többi szennyezőktől való szétválasztására alkalmas. Erre érdekes alkalmazást mutattak *Gold és mtsai* [6], akik különböző tisztaságú réz mintáik vizsgálata során azt tapasztalták, hogy az ún. nyomszennyező nagy változásokat okoz a termofeszültségben. Merve azonban a karakterisztikus termofeszültségeket is kimutatták, hogy valójában az oldott vas nyomszennyező hatását mérték, amely az oxid formájában eredetileg is jelenlevő vasnak az ún. ötvözése során bekövetkező redukálásával keletkezett.

A jelen munkában is a termofeszültséget és az elektromos ellenállást választottuk két mért paraméterként, és híg ötvözetek készítésével, valamint hőkezelésekkel bemutattuk, hogy ez a két mérés együttesen valóban jól alkalmazható a volfrám különböző nyomszennyezőinek és rácshibáinak megkülönböztetésére, és a hőkezelések során történő változások természetének felderítésére. (Erre külön egyik mérés sem elégséges.) Ezen mérések segítségével azt is sikerült kideríteni, hogy az ún. GK típusú volfrám huzaljaink termofeszültségében, és rekrisztallizált állapotban az elektromos ellenállásában is a kb. 50 súly ppm koncentrációban jelenlevő oldott vas dominál [7, 8].

Minthogy így az elektromos paraméterek mérésével a volfrám huzalok vas-tartalmának vizsgálatára igen érzékeny és gyors módszerhez jutottunk, számos érdekes technológiai folyamat nyomon követésére nyílik lehetőségünk: Először is a vas *közvetlen* hatása sem jelentéktelen az izzólámpák tulajdonságainak kialakításában: így pl. a halogén-lámpák gyártásánál arra is gondolni kellett, hogy az izzószálakból



kipárolgó vas nem mérgezi-e le a hasznos halogén körfolyamatokat [9]. Másrésről közvetett módon még nagyobb a jelentősége a vas-tartalom vizsgálatának: a drótban benn maradó vas-tartalom az eredeti vas-mennyiség mellett erősen függ attól is, hogy a szinterelés során milyen mértékben tudott kipárolgni a vas a volfrám rúd-ból. Ez viszont függ a szinterelés hőfokától, idejétől, valamint attól is, hogy a szinterelés során milyen gyorsan záródnak be a kipárolgást elősegítő rövidzárok (összefüggő póruszorok). Ez utóbbi tulajdonságok és paraméterek azonban a GK huzalok leglényegesebb adatait (creep-szilárdság, duktilitás, stb.) határozzák meg, ellenőrzésük tehát alapvető fontosságú lehet.

A vas kipárolgásának vizsgálata ezenkívül felhívta a figyelmet a volfrám egy specifikus tulajdonságára, mégpedig arra, hogy a szokásos ötvözési módszerekkel a volfrámból általában nem állíthatók elő egyensúlyi ötvözetek. Magas hőmérsékleten ugyanis a volfrámból vákuumban vagy inert gázban bármely ötvöző elem kipárolog, s a bennmaradó részük erősen inhomogén eloszlásban lesz jelen. Az inhomogén szennyező-eloszlás miatt az alacsony hőmérsékleten mért elektromos tulajdonságok eloszlás-függőek lesznek, tehát magas hőmérsékletű mérésekre, vagy inkább homogén ötvözetek előállítására van feltétlenül szükség ahhoz, hogy az intrinzik eltéréseket a Matthiessen-szabálytól megállapíthassuk.

A fentiek alapján azt gondolhatnánk, hogy a termofeszültség és elektromos ellenállás együttes mérése versenyben van a kémiai analitikával. Az elektromos paraméterekkel történő szennyező-szétválasztás természetesen kevesebbet mond, mintha minden lehetséges szennyezőre külön elvégeznénk a kémiai analízist, előnye viszont, hogy kis próbatesten is nagy érzékenységgel szétválasztja a fő szennyező-típusokat. Az elektromos mérések ezenkívül roncsolás-mentes vizsgálati módszerek, így alkalmasak egy adott próbatesten következők olyan kis változások tanulmányozására is, amelyeket a kémiai analitika nem tudna követni. Ezenkívül a kémiai analízis nem tud különbséget tenni oldott szennyezők és második fázisok között, a rácshibák vizsgálatára pedig teljesen alkalmatlan. Ezért úgy tekinthetjük, hogy a fizikai és kémiai módszerek inkább kiegészítik egymást.

## II.

### IRODALMI ÁTTEKINTÉS

#### 1. Az elektromos ellenállás és a Matthiessen szabály

Az elektromos ellenállásra vonatkozó általános ismereteket részletesebben megtalálhatjuk pl. [10] és [11]-ben, itt csak a dolgozatban közvetlenül felhasznált fogalmakat fogjuk röviden áttekinteni. A fémeken végzett ellenállásmérések célja általában a fajlagos ellenállás meghatározása, ez ugyanis csak a vezetők anyagától, hőmérsékletétől, valamint a szennyező és rácshibatartalmától függ (köbös fémeknél független a kristály-orientációtól is). Homogén vezetőknél az elektromos ellenállás,  $R$ , és a fajlagos ellenállás,  $\varrho$ , között lineáris kapcsolat áll fenn:

$$R = A\varrho \quad (1)$$

ahol  $A$  az ún. alakfaktor, amely egyenletes keresztmetszetű huzaloknál a vezetők hosszának ( $l$ ) és keresztmetszetének ( $q$ ) hányadosa.  $\varrho$  meghatározására így az alak-

faktor mérésére is szükség van, s ez különösen vékony huzaloknál igen nehéz feladatot jelent. Éppen ezért a fémek tulajdonságainak vizsgálatánál igen gyakran két különböző hőmérsékleten mért elektromos ellenállás hányadosát mérik, amit a hőtágulás elhanyagolása esetén a fajlagos ellenállások hányadosával azonosítanak:

$$r(T_1, T_2) = \frac{R(T_1)}{R(T_2)} = \frac{\varrho(T_1)}{\varrho(T_2)} \quad (2)$$

Az így kapott  $r$  mennyiség is független lesz a geometriai méretektől, tehát szintén alkalmas a fém tulajdonságainak jellemzésére. Adódhat azonban olyan eset is, amikor éppen az alakfaktor adja a fizikai információt, ilyen volt pl. a második fázisok vizsgálatának az esete [12].

Tiszta, rácshibáktól mentes fémekben csak a hőmérséklet hatására bekövetkező rácsrezgéseken (fononokon) történő elektronszórás okoz ellenállást, és ennek hőmérséklet-függését jól közelíti Grüneisen [13] formulája, amely szerint  $\varrho(T)$  alacsony hőmérsékleten kb.  $T^5$ -nél, magas hőmérsékleten pedig kb.  $T$ -vel arányos (az átmeneti tartomány kb.  $\theta_R/4$  és  $\theta_R/2$  között van, ahol  $\theta_R$  az ún. elektromos Debye hőmérséklet, ami általában a rácsfajhő Debye hőmérsékletéhez hasonló érték).

Ha a fémbe sztatikus rácshibák és szennyező atomok is vannak jelen, úgy ezek további szórócentrumokat jelentenek a fononok mellett. Az eredő ellenállásra közelítőleg érvényes az ún. Matthiessen-szabály [14] (a továbbiakban röviden MSz), amelynek szokásos alakja a következő:

$$\varrho(T) = \varrho_t(T) + \sum_{x_i} \varrho_{x_i} \quad (3)$$

ahol  $\varrho(T)$  az eredő ellenállás,  $\varrho_t(T)$  a „tisztá” fém ellenállása,  $\varrho_{x_i}$  pedig az  $x_i$  szennyező-fajta által okozott hőmérséklettől független ellenállás-járulék. A  $\varrho_{x_i}$  értékek koncentráció-arányosságát és additivitását általában csak pontos kémiai analitika segítségével lehet vizsgálni, közvetlenebbül csak  $\sum_{x_i} \varrho_{x_i}$  hőmérséklet-függetlenségét észlelhetjük.

Éppen ezért a legtöbb esetben egyszerre csak egyetlen szennyező- vagy rácshiba-típus  $\varrho_x$  többletellenállását vizsgálják, és ekkor a MSz alakja a következő:

$$\varrho(T) = \varrho_t(T) + \varrho_x \quad (4)$$

A mért ellenállás értéke  $T=0$ -nál ( $\varrho_t(0)=0$  miatt)  $\varrho_x(0)$ , ezt megkülönböztetésül maradékellenállásnak szokás nevezni. Gyakran a maradékellenállástól való relatív eltéréseket nevezik MSz-tól való eltérésnek (később látni fogjuk, hogy inhomogén szennyezőeloszlásnál ez nem szerencsés választás).

A fajlagos ellenállás mérésének célja általában a  $\varrho_x$  többletellenállás meghatározása, de mivel összehasonlításként nem áll rendelkezésünkre abszolút tiszta drót, ezért általában megelégszünk, ha helyette egy elég tiszta etalonhoz viszonyított  $\varrho'_x$  értéket mérünk. A MSz érvényessége esetén azonban az  $r$  ellenállás-hányadosokból is kiszámíthatunk egy  $\varrho'_x$ -szel arányos értéket, ugyanis ebben az esetben (2) és (3) segítségével belátható, hogy

$$\delta(T_1, T_2) = \frac{r_p(T_1, T_2) - r_e(T_1, T_2)}{1 - r_p(T_1, T_2)} = \frac{\varrho'_x}{\varrho_e(T_2)} \quad (5)$$

ahol a  $p$ , ill.  $e$  index a „próbatesszt”-re, ill. az „etalon”-ra vonatkozik. Az így kiszámítható  $\delta$  érték tehát a MSz érvényessége esetén nem függ  $T_1$ -től, és  $\varrho'_x$ -vel arányos.



A MSz érvényességét elméletileg csak gömbalakú Fermi felület esetén, egymástól független szórócentrumoknál várhatjuk, a szórásnak pedig ezenkívül izotropnak, és a fononokon való szórást kivéve energia-függetlennek kell lennie. Ezért érthető, hogy a MSz-tól való eltérések vizsgálata igen sok információt nyújthat a fémes vezetés mechanizmusának részleteiről, és ezek a vizsgálatok fel is lendültek, ahogy a kísérleti technika elérte a szükséges színvonalat. A fenti feltételek sejteni engedik, hogy milyen esetekben várhatunk eltéréseket a MSz-tól. A MSz-tól való eltérések különböző típusait Bass [15] ismerteti összefoglaló cikkében, itt csak a főbb jellegzetességekre térünk ki. Megjegyezzük még, hogy a MSz-tól való gyakori eltérések ellenére a MSz nem veszti el értelmét, ugyanis a többletellenállás ( $\varrho_x$ ) hőmérséklet-függése a legtöbb esetben csak 10 % nagyságrendű változást jelent (bár egyes esetekben kétszeres változást is találtak, pl. [16]), ugyanakkor a tiszta fémek fajlagos ellenállása sok nagyságrendet változhat (pl. volfrámon 1,4 K és 273 K között kb.  $10^{-5}$ -ről  $5 \mu\Omega \text{ cm}$ -re nőtt, [17]).

Gyakoriak a MSz-tól való olyan típusú eltérések, amikor a mért többletellenállás közelítőleg állandó értékekhez tart alacsony és magas hőmérsékleteken, és a változás csak egy átmeneti tartományban jelentkezik, éspedig ott, ahol a többletellenállás és a tiszta fém ellenállása közelítőleg azonos nagyságú.

Ilyen típusú a hőmérsékletfüggés pl. kétsávós vezetésnél, ahol a többletellenállás hőmérsékletfüggését a következő képlet írja le [18]:

$$\varrho_x(T) = \varrho_x(0) + \frac{\varrho_x(0) \cdot \varrho_t(T)}{\alpha \varrho_x(0) + \beta \varrho_t(T)} \quad (6)$$

ahol  $\alpha$  és  $\beta$   $T$  től független csatolási állandók. Ugyanilyen jellegű hőmérséklet-függést kapunk pl. anizotrop Fermi felület [19], anizotrop szórócentrumok [20] esetén, vagy inhomogén szennyezőeloszlásnál [21]. A (6) képlet monoton növekvő hőmérsékletfüggést ír le, de sok esetben találtak az átmeneti hőmérséklet-tartományban maximumot is, főleg híg ötvözeteknél (ezt pl. rugalmatlan elektron-fonon szórások okozhatják [22]).

A MSz-tól más típusú eltérést okoz az, hogy egész magas hőmérsékleten a szórási tulajdonságok nem maradnak változatlanok, így  $\varrho_x$ -ben lassú, első közelítésben lineáris változást kapunk (lehet növekvő, vagy csökkenő is), amelynek szokásos relatív nagyságrendje  $10^{-4}/\text{K}$ .

A MSz-tól való eltérések különleges típusa az ún. Kondo effektus [24], amely lokalizált, mágneses momentummal rendelkező szennyező atomokon történő szórásnál lép fel. Ennek jellegzetessége, hogy  $\varrho_x(T)$ -ben az ún. Kondo hőmérséklet ( $T_K$ ) körül egy  $c \log T$ -vel arányos extra ellenállás-járulék lép fel, amely legtöbbször  $T$ -vel csökkenő (l. 2.a ábra). Magas és alacsony hőmérsékleteken  $\varrho_x(T)$  konstans értékekhez tart, a (6) típusú hőmérsékletfüggéshez viszonyítva azonban lényeges különbség, hogy az átmeneti hőmérséklet-tartomány több nagyságrendet változhat a szennyezőtől függően (pl. Cu és Au különböző híg Kondo-ötvözeire  $T_K$  kb.  $10^{-2}$  és  $10^4$  K között változik [25]).

A fémekben azonban nem csupán az oldott szennyezők okozhatnak változást az ellenállásban. Az elektronok szóródhatnak pl. a próbatest felületén is, az ebből adódó többletellenállás [26, 27]:

$$\varrho_x = p \cdot k \cdot \varrho_t(T) \frac{\lambda(T)}{D} \quad (7)$$

ahol  $p$  a felülettől függő állandó 0 és 1 között,  $k=3/8$  lemeznél és  $k=3/4$  huzalnál,  $D$  a próbatest átmérője,  $\lambda(T)$  pedig az elektronok szabad úthossza.

Ha nem vezető második fázisok is vannak jelen a fémekben, úgy ezek makroszkópikus méretek esetén csak az alakfaktorban okoznak változást, ha viszont az átmérőjük ( $d$ ) kisebb az elektronok szabad úthosszánál, akkor egyszerűen szórócentrumként viselkednek, amelyek többletellenállását durván megbecsülhetjük:

Azonos méretű gömbalakú második fázisok feltételezésével a szórási hatáskeresztmetszetüket azonosítsuk a geometriai hatáskeresztmetszettel ( $Q=d^2 \cdot \pi/4$ ). Ha  $c$  a térfogati koncentráció, akkor a második fázisok száma  $\text{cm}^3$ -ként:  $n=6c/(d^3 \cdot \pi)$ , így az ezeken való szórásból adódó szabad úthossz:

$$\lambda = 1/(nQ) = 2/3 \cdot d/c. \quad (8)$$

Mínthogy volfrámban  $\lambda(T) \cdot \varrho(T)/\varrho(273 \text{ K}) = 3,8 \cdot 10^{-6}$  [17], így 1 at%-nyi egyenként  $d$  Å átmérőjű második fázis hatása a volfrámra:

$$\varrho_x = 27/d \mu\Omega \text{ cm} \quad (9)$$

## 2. A termofeszültség és a Nordheim-Gorter szabály

A termoelektromos mennyiségek a fémek hőmérsékletére, összetételére és rácshiba koncentrációjára jellemzőek, és nagy előnyük más mennyiségekkel szemben, hogy nem függenek a vezető geometriai méreteitől. Ezen mérések viszonylag könnyű kivitelezhetősége és nagy érzékenysége igen alkalmassá teszi őket fémfizikai vizsgálatokra. A jelen dolgozatban történő alkalmazásuk miatt röviden tekintsük át főbb tulajdonságaikat (részletesebben I. [28], [29]). A leggyakrabban vizsgált termoelektromos mennyiség az abszolút termofeszültség,  $S$ , amely a nyílt vezetőkben egységnyi hőmérséklet-gradiens hatására keletkező térerősség. Legkönnyebben az ún. relatív termofeszültséget kaphatjuk meg egy két fémből álló nyitott körben a kis hőmérséklet-különbség ( $\Delta T$ ) hatására fellépő elektromos feszültség ( $\Delta V$ ) mérésével:

$$S_A(T) - S_B(T) = \frac{dV}{dT} \simeq \frac{\Delta V}{\Delta T} \quad (10)$$

ahol  $S_A$  és  $S_B$  az  $A$  és  $B$  fém abszolút termofeszültségei,  $\Delta T$  pedig a kontaktusok hőmérsékletei közti különbség. Már sok tiszta fémnél mérték abszolút termofeszültséget  $T$  függvényében (néhány fémre ezt az 1. ábra mutatja) ezek segítségével (10)-ből megkaphatjuk más fémekre vagy ötvözetekre is.

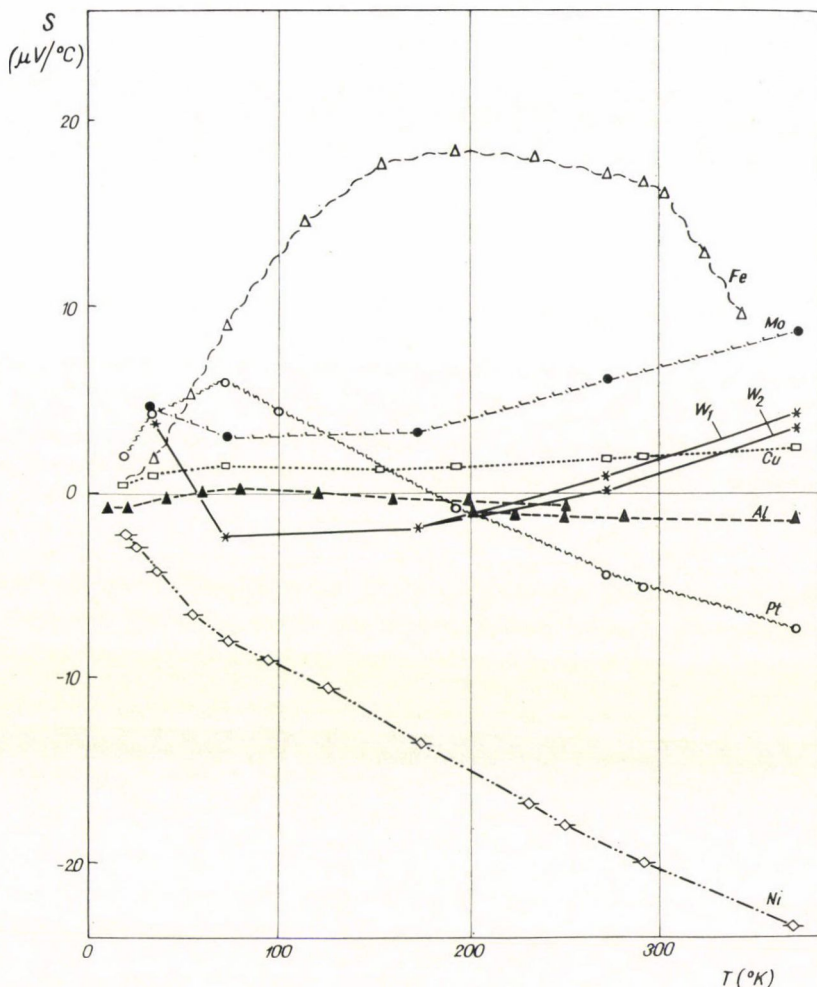
Egy vezetőkben a vezetési elektronok diffúziója által keltett termofeszültséget a Boltzmann-egyenlet alapján — legalábbis a relaxációs-idő közelítés érvényességi határán belül — a következő kifejezéssel írhatjuk le:

$$S = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e} \cdot \left[ \frac{1}{\varrho(E)} \cdot \frac{\partial \varrho(E)}{\partial E} \right]_{E=E_F} \quad (11)$$

ahol  $k_B$  a Boltzmann-állandó,  $e$  az elektron töltése,  $E_F$  a Fermi-energia,  $\varrho(E)$  pedig a fajlagos ellenállás változása lenne a Fermi-energia változása esetén. A (11) differenciális energiafüggés miatt a termofeszültség az elektromos ellenállásnál sokkal érzékenyebben reagál a Fermi-felület alakjának változásaira, és a szennyezők által



okozott szórás energiatfüggésére.  $\varrho(E)$  energiatfüggését gömb alakú Fermi-felület esetén szabad elektron közelítésben megbecsülve (merev szóró-falak esetén, vagy leárrnyékolt coulomb-szórásnál) a (11) képletből azt kapjuk, hogy a termofeszültségnek  $T$ -vel arányosnak, és szobahőmérséklet körül  $-1 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$  nagyságrendűnek kell lennie. Az 1. ábrán láthatjuk, hogy ez a szabály egyáltalán nem teljesül, és még



1. ábra. Néhány tiszta fém abszolút termofeszültsége a hőmérséklet függvényében [30].

a gömbhöz legközelebb álló Fermi-felületű Cu és Au esetén is pozitív a termofeszültség értéke. A magyarázatot mégis az adja, hogy a termofeszültség nagyon érzékeny a Fermi-felület kis változásaira is, az átmeneti fémekben pedig a komplikált Fermi-felület miatt a termofeszültségnek nemcsak az előjele, hanem a nagyságrendje is egészen különböző lehet. Szembetűnő jelenség még, hogy alacsony hőmérsékleteken

minimum (esetleg maximum is) fellép a hőmérsékletfüggésben (1. ábra). Ennek oka az ún. fonon-szél, ami a következő módon keletkezik: a hőmérsékletgradiens hatására fonon-áram is fellép, és ennek során a fononok az elektronoknak ütközéseik során ezen áram irányába eső impulzust adnak át, ami extra negatív termofeszültségként jelentkezik (ez jó közelítéssel összeadódik a más forrásból származó termofeszültségekkel). Az ún. normál ( $N$ ) ütközések kb.  $\theta_R/5$  körüli hőmérsékleten minimumot okoznak, az umklapp ( $U$ ) folyamatok (ütközés Bragg-reflexióval) hatására pedig maximum lép fel. Szobahőmérsékleten a fonon-szél hatását általában már elhanyagolhatónak tekintik.

Ha egy fém különböző szennyezőket és rácshibákat is tartalmaz, akkor tételezzük fel, hogy ezekre érvényes a MSz. Ha tehát (11)-be behelyettesítjük a MSz (3) alakját, akkor az eredő termofeszültségre kapjuk:

$$S(T) = \frac{S_t(T)q_t(T) + \sum_{x_i} S_{x_i}(T) \cdot q_{x_i}}{q_t(T) + \sum_{x_i} q_{x_i}} \quad (12)$$

ahol  $S_t(T)$  a tiszta fém termofeszültsége,  $S_{x_i}(T)$  pedig az  $x_i$  szórófajta által okozott ún. karakterisztikus termofeszültség. Független szórócentrumok esetén tehát az egyes szórófajták által okozott karakterisztikus termofeszültségek nem közvetlenül adódnak össze, hanem az ellenállásokkal súlyozva. Ha csak kétféle szórási mechanizmus van jelen (fononok és egyféle szennyező vagy rácshiba), akkor a MSz (4) alakja érvényes, és ekkor (egy adott  $T$  hőmérsékleten) az eredő termofeszültségre kapjuk:

$$S = S_x + (S_t - S_x) \frac{q_t}{q_t + q_x} \quad (13)$$

(13) szerint a szennyező koncentrációját változtatva azt kapjuk, hogy a termofeszültség a reciprok ellenállás függvényében egyenes, amelynek tengelymetszete  $S_x$ . Ez a szabály Nordheim—Gorter-szabály [5] néven ismert (a továbbiakban NGSz). A méréseink kiértékelését a NGSz alapján végeztük, de mivel összehasonlításul csak egy  $S_e$  abszolút termofeszültségű etalon állt rendelkezésünkre ( $S_t$  helyett), és ellenálláshányadosokat mértünk, ezért célszerű a képletet (5) alapján a következő alakba átírni:

$$\Delta S = S_{xe} \frac{\delta}{1 + \delta} \quad (14)$$

ahol  $\Delta S$  az etalonhoz viszonyítva ténylegesen mért termofeszültség, és  $S_{xe} = S_x - S_e$ . Természetesen (14)-ben gondoskodni kell arról is, hogy  $\Delta S$  és  $\delta$  értékei azonos hőmérsékletre vonatkozzanak.

A Kondo-effektus [24] szerepe a termofeszültségben igen jelentős, ugyanis a mágneses momentummal rendelkező szennyezők által okozott elektron-szórás erősen energiafüggő, (11) szerint tehát igen nagy termofeszültségekre számíthatunk. Ez különösen feltűnő lehet néhány K hőmérsékleten, ahol a tiszta fémek termofeszültsége a lineáris  $T$ -függés miatt  $0,01 \mu\text{V/K}$  nagyságrendű, az igen kis koncentrációban jelenlevő mágneses momentummal rendelkező szennyezők pedig akár  $10 \mu\text{V/K}$  nagyságrendű ún. „óriás” termofeszültséget is létrehozhatnak. A 2. ábra mutatja összehasonlításul az ellenállás és termofeszültség jellegzetes hőmérsékletfüggését



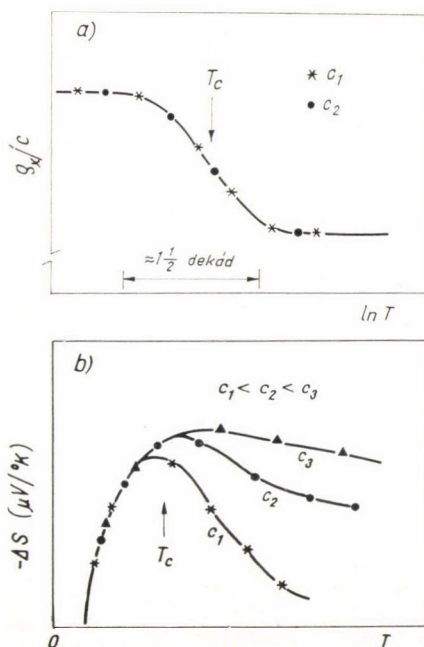
Kondo-effektus esetén. Láthatjuk, hogy  $\varrho_x/c$  értéke független a szennyező koncentrációjától, a mért termofeszültség ( $\Delta S$ ) viszont bonyolult  $c$ -függést mutat (később, a 8. ábrán látni fogjuk, hogy nem lép fel koncentrációfüggés, ha a karakterisztikus termofeszültséget mérjük).

Az előzők alapján azt várhatjuk, hogy a NGSz érvényességének a MSz érvényességétől kell függenie, *de Blatt* és *Lücke* [32] kétkomponensű rendszerekre vonatkozó kísérleti adatok alapján úgy találták, hogy az NGSz érvényessége általánosabb, elég jól teljesül olyan esetekben is, amikor lényeges eltérések vannak a MSz-tól. *Guenault* [33] szerint viszont anizotrop Fermi-felület esetén nem a NGSz-ból kell számítani a karakterisztikus termofeszültségeket, hanem egy bizonyos kétsávos modellből, amely magasabb hőmérsékleten különösen homovalens ötvözeteknél eltérő eredményt adhat. Ez a kétsávos modell abban különbözik a NGSz-től, hogy nincs benne sávok közötti átmenet, így kérdéses, hogy melyik teljesül jobban. Ha azonban csak a szennyezők megkülönböztetésére akarjuk használni a karakterisztikus termofeszültséget, akkor mindegy, hogy melyik modellből kapott értéket fogadjuk el a szennyező jellemzésére. Még mindig felmerül azonban az a kérdés, hogy ilyen komplikált Fermi-felületű fémre, mint a volfrám, érvényes-e egyáltalán a NGSz. Ezzel kapcsolatban elég, ha arra gondolunk, hogy a független szórási modell következményeként a NGSz mindig érvényes egy adott hőmérsékleten elég kis koncentrációknál. Egyféle szennyező esetén a termofeszültség-ellenállás diagramon ilyenkor lineáris összefüggést kapunk, több különböző szennyező vagy rácshiba összetevése esetén pedig a hatások vektorálisan adódnak össze.

### 3. A volfrám alapanyag és elektromos tulajdonságai

A dolgozatban felhasznált próbatestek porkohászati úton előállított, általában izzólámpák céljára készült volfrám huzalok vagy spirálok voltak, ezek előállításának és tulajdonságainak számunkra lényegesebb vonásait itt vázoljuk ([34]–[39] alapján):

A porkohászati volfrám előállításánál még a volfrám oxidjaihoz többnyire különböző adalékokat kevernek, majd  $H_2$ -es redukcióval volfrám fémport készítenek belőle. A fémport préselik, majd előszinterelés után szinterelik. A szinterelést  $H_2$  gázban végzik, amikor is a volfrám rudat átmenő árammal közel az olvadáspont-



2. ábra. Az egységnyi koncentrációra eső többletellenállás (a) és a termofeszültség-különbség (b) hőmérséklet-függése különböző koncentrációjú, Kondo rendszert alkotó szennyezőkre ( $T_c$  a Kondo hőmérséklet) ([31]).

jaig izzítják. Eközben a volfrám tömörödik (sűrűsége kb.  $11 \text{ g/cm}^3$ -ról majdnem  $18 \text{ g/cm}^3$ -re nő), és a rúdiban levő szennyezők nagyrésze elpárolog. A kb. 1 cm átmérőjű szinterelt rudakat körkovácsolással, majd (1—2 mm átmérő után) dróthúzással huzallá alakítják. Az alakítás hőmérséklete a csökkenő átmérővel kb.  $1500^\circ\text{C}$ -ról kb.  $500^\circ\text{C}$ -ra csökkenthető, de a nagyfokú felkeményedés miatt bizonyos átmérőknél (pl. 0,17 mm-nél) közbeni hőkezelést szoktak alkalmazni. A dróthúzás nagyobb átmérőknél volfrámkarbid, vékonyabb huzaloknál gyémánt húzóköveken át történik. Az izzólámpákban szokásos huzalméreteket (kb. 10—60  $\mu$ ) végül az ún. finom húzás során alakítják ki. Ezekből megfelelő spiralizálás és hőkezelés után készülnek az izzólámpák spiráljai és duplaspiráljai.

Az adalékmentes volfrámból előállított huzalokban az izzítás során fellépő nagyfokú szemcsehatár-mozgás nem teszi lehetővé, hogy belőlük magas hőmérsékleten izzó, alaktartó lámpaspirálok készüljenek. A  $\text{ThO}_2$ -os adalékú huzalokban a finoman eloszlott  $\text{ThO}_2$  akadályozza meg a szemcsehatár-mozgást, de hosszas izzítás során ez a hatás fokozatosan megszűnik a  $\text{ThO}_2$  redukciójával. A creep-szilárdság növelésének másik útja az, hogy a redukció előtt K és Si vegyületeket, újabban pedig K, Si, Al vegyületeket adalékolnak néhány tized %-ban. Ez utóbbi adalékokkal kapják az ún. GK elnevezésű huzalokat, amelyekben a szekundér rekristallizáció hőmérséklete kb.  $2500 \text{ K}$ -ig emelkedett, és ennek során igen hosszú, átlapoló kristályok keletkeztek, ahol a szemcsehatár-csúszás elhanyagolhatóvá vált. Így jó minőségű, nagy fényhasznosítású, magas hőmérsékleten is alaktartó lámpaspirálok készülnek belőlük.

A volfrám huzalok közötti különbségeket nem egyedül az adalékok okozzák, hiszen a megfelelő adalékokhoz a szinterelés körülményeit is megfelelőnek kell választani, ezenkívül az adalékok is csak a redukció előtt hozzáadva fejtenek ki hasznos hatást. Az adalékokkal készült volfrám huzalok nem feltétlenül tartalmazzak több idegen anyagot, hiszen Pácz [40] még éppen azzal magyarázta az adalékok szerepét, hogy ezek mint salakanyagok elősegítik a szennyezők jobb kipárolgását a szinterelés folyamán. Mai ismereteink szerint az adalékok hatását a következő módon képzelhetjük el: ([41]—[43]). A szinterelés során a szennyezők és adalékok nagyrésze kipárolog a volfrám rúdból, de a volfrámban gyakorlatilag oldhatatlan kálium egy része buborékok formájában bennmarad. A többi adalék szerepe valószínűleg abban áll, hogy még a redukció előtt a szemcsék belsejébe juttatják a kálium egy részét megfelelő vegyületek alakjában, így az a szinterelés során buborékok alakjában be tud záródni. A kovácsolás és dróthúzás során ezek a kálium buborékok elnyúlnak, majd buborékok sorára szakadnak fel, amelyek megakadályozzák a keresztirányú újrakristályosodást a huzalban. Ezért az újrakristályosodás csak magasabb hőmérsékleten következik be, és ekkor hosszú, átlapoló kristályok keletkeznek. Ezek a buborékok igen stabil képződmények, csak lassan távoznak a volfrámból, főleg kitörések formájában [44], a későbbiek során pedig összegyűlhetnek a szemcsehatárokon is, ahol a kiegészben is szerepük lehet [45]. Említsük meg még, hogy az adalékok helyettesíthetők bizonyos más elemek vegyületeivel is [36], [46].

A különböző szinterelt rudakon végzett kémiai analízisek [34], [47], [48], [43], [49], stb.) alapján azt mondhatjuk, hogy az ún. „hasznos” adalékok a kész rúdiban általában csak igen kis koncentrációban vannak jelen, rajtuk kívül viszont számos más szennyezők is találhatók hasonló, vagy esetleg még nagyobb mennyiségben is, bár az egyes szennyezők mennyisége ritkán haladja meg a  $100 \text{ ppm}$ -et. A rudakban talált gyakoribb szennyezők a K, Si, Al mellett a Fe, Mo, C, O, N, stb. A kis



koncentrációban jelenlevő oldott szennyezők tanulmányozására különösen alkalmas módszer az alacsony hőmérsékleten végzett elektromos ellenállás mérése, így főleg folyékony hélium hőmérsékletén a volfrám szennyezőire is találunk mérési adatokat. Szobahőmérséklet körül inkább csak koncentráltabb ötvözetekre van néhány adat vagy többen csak az ellenállás hőmérsékleti tényezőjét mérték. Az I. táblázatban, összefoglaltuk a néhány százaléknál nem nagyobb szennyező-koncentrációra vonatkozó adatokat, mindegyiket 1 at %-ra átszámítva.

Az I. táblázatból nem vonhatunk le következtetéseket a MSz-tól való eltérésekre, hiszen ott még az azonos hőmérsékleten mért adatok között is igen nagy eltérések vannak a különböző szerzők között (ezekre a nagy mérési bizonytalanságokra a dolgozatban még visszatérünk).

Külön említjük még meg az intersticiális szennyezőket (pl. N, O, H és C), mivel ezek általában jól oldódnak és nagy szerepet játszanak a V, Nb és Ta-ban,

### I. TÁBLÁZAT

Többlet-ellenállások volfrámban 1 at% oldott szennyező hatására

Oldott anyag	Koncentráció at%-ban	$\rho_x(T)$ , ( $\mu\Omega\text{cm/at}\%$ ) 4,2 K-en 273 vagy 293 K-en	Hivatkozás
C	0,02	3,7	[50]
Fe	0,1	1,8	[51]
	0,13	8,0	[52]
Mo	0,1; 1	0,15	[53]
	1,3; 7,3	0,3	[55]
Nb	0,1; 1	0,35	[53]
	0,1	0,9	[51]
Re	0,1; 1	0,15	[53]
	0,1	0,8	[51]
Ta	0,1; 1	0,5	[53]
	1	0,8	[54]
	2,1; 3,8	1,0	[55]
Ti	0,1; 1	0,9	[53]
	0,1	1,7	[51]

ugyanakkor az oldhatóságuk Mo és W-ban több nagyságrenddel kisebb [1], [2]. Ezek oldékonysága erősen függ a hőmérséklettől és a gáznyomástól, és mivel az intersticiális szennyezők diffúziója igen gyors, ezért vákuumban történő hőkezeléssel viszonylag gyorsan eltávolíthatók a volfrámból. (Volfrámban a C, N és H oldékonyságára [56], [57] és [58]-ban találhatunk adatokat).

A volfrám mechanikai megmunkálása során keletkező rácshibák tanulmányozására ugyancsak ideális alkalmazási területet jelent az elektromos ellenállás mérése, hiszen hőkezelések során a különböző típusú rácshibák különböző hőmérsékleteken távoznak, így egymástól általában jól megkülönböztethetők. A ponthibák a volfrám huzalból általában már a dróthúzási hőmérséklet alatt eltávozhatnak, így ezek csak besugárzás, kvencselés vagy alacsony hőmérsékletű deformáció után tanulmányozhatók (pl. [59], [60], [51]).

[1], [2] alapján összefoglalva azt mondhatjuk, hogy a volfrámban jelentősebb, ponthibák megújulásával kapcsolatos lépcsők vannak kb. 100 K alatt és 600–700 K között (ezeket I., ill. III. lépcsőknek nevezik), és ezek között helyezkedik el a sokkal

laposabb, erősen szennyezőfüggő II. lépcső. A III. lépcsőt tulajdonították korábban vakanciáknak, de most egyfajta  $\langle 110 \rangle$  szimmetriájú interstíciós hibának a vakanciákhoz történő diffúziójával magyarázzák, és eszerint a megmaradó vakanciák a IV. lépcsőben távoznak. A IV. lépcsőben már (kb. 900 K fölött) a folyáshatár és a röntgen vonalszélesség csökkenése figyelhető meg, ami diszlokációk mozgásának tulajdonítható [47]. Tiszta volfrám huzalokban 1200 K körül bekövetkezik az újrakristályosodás [51]. Az adalékokkal készült pormetallurgiai volfrámhuzalokban a IV. és V. lépcső magasabb hőmérsékletek felé tolódik, és pl. a K, Si, Al-mal készült GK huzalokban 2000 K fölött a szekundér rekristallizációval együtt újabb jelentős lépcső kezdődik [51], [61] (VI. lépcső).

### III.

## A MÉRÉSEK ÉS A KIÉRTÉKELÉSÜK MÓDJA

### 1. A próbatetek előkészítése

A mérésekhez használt próbatetek általában K, Si, Al adalékokkal készült (ún. GK-típusú) porkohászati volfrám huzalok, vagy néhány esetben spirálok voltak. Méréseinkhez a próbateteket különböző hőkezeléseknek vetettük alá. A volfrám huzalok hőkezelése nyílt vákuumrendszerben történt (kb.  $1 \cdot 10^{-4}$  hgm vákuumnál), a spiráloké pedig vákuum vagy gáztöltésű zárt lámpákban. A próbatetek hőkezelési hőmérsékletét a rajtuk átfolyó árammal állítottuk be, a huzaloknak vákuumban történő hőkezelésénél a hőmérsékletet az átfolyó áram nagyságából és a huzalátmérőből számítottuk [62] alapján, gondosabb méréseknél, vagy alacsony hőmérsékletű hőkezeléseknél pedig az ellenállás-hányadosból  $R(T)/R(293)$ . A volfrám spirálok hőmérsékletét minden esetben az ellenállás-hányadosból számítottuk.

Magasabb hőmérsékleten végzett ízzításoknál a bevezetők által okozott hőelvezetés a huzalok 1—3 cm-es végeit leszámítva nem befolyásolja a hőmérsékletet, alacsonyabb hőmérsékleteken (főleg 1000 K alatt) azonban a bevezetők által okozott hőelvezetés erősen inhomogénná teszi a hőmérséklet-eloszlást [63]. Ez utóbbi esetben csak az ellenállás-hányadosból mért hőmérséklet lesz megbízható. Az ellenállás-hányadosokat nikkel potenciálvezetékek segítségével lehetett mérni, ez a módszer azonban nem volt alkalmazható magasabb hőmérsékleteken, mert a W-Ni ötvözetek olvadáspontján a potenciálvezetékek leolvadtak. A bevezetők mellé tett potenciálvezeték rövid huzaloknál nagyon pontatlan eredményt adott, a volfrám spirálok nagy ellenállása mellett azonban a bevezetők ellenállása már csaknem elhanyagolható volt, így ez a módszer alkalmazható volt a spirál-hőmérséklet ellenállás-hányadosból történő számítására.

A volfrám huzalok keresztmetszetében fellépő inhomogenitások tanulmányozására azok felületi rétegét kb. 5%-os NaOH oldatban történő elektropolírozással távolítottuk el. Különböző nyomszennyezőket úgy juttattunk utólag a volfrám drótbá, hogy azokat a vákuum-párolgatással (pl. Al és Ge) vagy elektrolitikus úton (Fe, Ni és Pt) a próbatest felületére juttattuk, majd vákuumban ízzítva a szennyező egy részét a huzal belsejébe diffundáltattuk. A szennyezők bediffundáltatását vákuumban 2000 K és 2800 K-en 15—15 perces hőkezeléssel végeztük. A 2000 K-en történő hőkezelésnél a huzalban még jelenlevő szemcsehatárok elősegítették a szeny-



nyezők bediffundáltatását, ugyanakkor a beviendő anyag lepárolgása a felületről még nem volt túl gyors. 2800 K-en már végbement a szekunder rekrisztallizáció, a szennyezők maradéka gyorsan lepárolgott a felületről, és a szennyezőeloszlás bizonyos mértékig homogenizálódott. A huzal azonban így is nagyon inhomogén maradt, erre tehát a továbbiakban tekintettel kellett lennie.

A rácshibák vizsgálatára deformációt alkalmaztunk, erre a célra általában megfelelt az üzemi körülmények között történt dróthúzás. Minthogy azonban a dróthúzás végső hőmérséklete 500 °C körül lehetett, ezért az alacsony hőmérsékleten kimenő rácshibák vizsgálatára csavarási deformációt alkalmaztunk (szobahőmérsékleten).

## 2. A mérések módja

Az elektromos ellenállás mérését kompenzátor segítségével végeztük. Az ellenállásokat normál ellenállásokkal hasonlítottuk össze, és galvanométerként Keithley-típusú nanovoltmértet alkalmaztunk. Általában 4–8 próbatestet kötöttünk sorba, az összekötő és potenciálvezetékek 0,1–0,2 mm átmérőjű nikkel huzalok voltak. Ha ugyanazon a próbatesten további méréseket is kellett végezni, akkor rugós érintkezőkkel csatlakoztunk hozzá.

A próbatesteket méréskor általában folyadékba mártottuk, ezzel ugyanis homogenebb hőmérséklet-eloszlást érthetünk el, másrészt pedig nagyobb mérőáramot lehetett használni a melegedés veszélye nélkül (általában 0,03–0,1 amper). A méréshez használt folyadék 4,2 K-en hélium, 77 K-en nitrogén, 77–300 K között alkohol, 373 K-en pedig paraffin olaj volt. A 373 K-es hőmérsékletet kívülről forrásban levő víz állította be, a 77 és 250 K közötti hőmérsékleteket pedig úgy érték el, hogy a próbatest edényét fűtöttük, kívülről megfelelő hőszigetelésen keresztül pedig folyékony nitrogénnel hűtöttük. A lámpaburában elhelyezett volfrám spirálokat csak szobahőmérsékleten és folyékony nitrogénben mértük, és mivel ezeknél a gáz- vagy még inkább a vákuumtöltés hővezetése sokkal rosszabb volt, így sokkal kisebb mérőáramokat kellett alkalmaznunk. (Pl. 220 V 15 W-os vákuumlámpák izzószálat  $10^{-4}$  ampernél kisebb árammal lehetett csak mérni.)

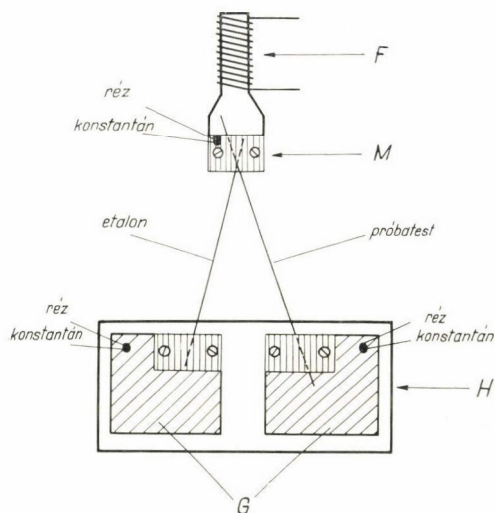
Az ellenállás mérésekhez minden esetben etalont alkalmaztunk összehasonlításként. Etalonként általában a legtisztább GK-típusú huzalunkat választottuk 2800 K-en 15 percig tartó hőkezelés után (vákuumban). Ekkor ennek az ellenálláshányadosa  $R(4,2\text{ K})/R(300\text{ K}) \approx 0,0050$  volt. A későbbiekben ezt a legtisztább GK huzalt egyszerűség kedvéért E-vel fogjuk jelölni („etalon”). Általában az etalon ellenállásából állapítottuk meg a mérési hőmérsékletet, és az ellenállás-hányadosokban bekövetkező változásokat mindig az etalonhoz viszonyítottuk.

A termofeszültség mérésének főbb módjait *Barnard* [28] könyve ismerteti, közülük kiindulási alapul *Nagy* és *Tóth* [64] rövid huzalokra és magasabb hőmérsékletű mérésekre szolgáló módszerét vettük. Mérőberendezésünk vázlata a 3. ábrán látható, ahol a két volfrám huzal (etalon és próbatest) az M melegponton érintkezett egy viszonylag kis tömegű réz befogóban. A H hidegpont nagyobb tömegű réz befogókból állt, ahol a volfrám huzalok réz vezetékeken keresztül a G galvanométerhez csatlakoztak (kompenzátoron keresztül). A méréshez általában Kipp and Zonen-gyártmányú galvanométert vagy Keithley-típusú nanovoltmérőt használtunk. A mérőelrendezés M és H pontjainak hőmérsékletét külön réz-konstantán termoelemek mérték, egy másik kompenzátor és galvanométer segítségével. A jobb hőmérséklet-



homogenizálás céljából a H ponton levő két réztömböt vékony szigetelőréteg alatt közös nagy rézblokk kötötte össze. Az M melegpontnál a volfrám huzalok vagy közvetlenül érintkeztek a rézzel, vagy csak egy vékony szigetelőrétegen keresztül. A közvetlen érintkezés előnye a jobb hőátadás, és hogy ilyenkor kisebb volt a huzalok törésének valószínűsége, hátrány volt viszont, hogy ilyenkor a réz miatt esetleges parazita termofeszültségeket is belemérhettünk. A mérések szerint ez szobahőmérsékleten elhanyagolható volt (a réz és volfrám hasonló termofeszültsége miatt, lásd 1. ábra), más hőmérsékleteken azonban vékony szigetelőréteget alkalmaztunk.

A termofeszültség mérése általában úgy történt, hogy hideg állapotban nulláztuk a galvanométert, majd az M melegpontot az F fűtőtekercs segítségével  $25^{\circ}\text{C}$ -



3. ábra. Mérőfej a próbatestek differenciális termofeszültségének meghatározására.

szal a szobahőmérséklet fölé fűtve mértük a két volfrám között fellépő feszültség-különbséget. A fűtést eleinte gyorsabban, majd a  $25^{\circ}\text{C}$  hőmérséklet-különbség elérése előtt egészen lassan végeztük, és kontrollként visszahűtés-kor is mértük a termofeszültséget. A két érték különbsége általában jóval kisebb volt a reprodukálhatóságnál (ami kb.  $0,01 \mu\text{V}/^{\circ}\text{C}$  volt). Minden mérést megismételtünk a próbatest új befogásával, hogy az esetleges rossz behelyezésből adódó hibák kitűnjenek. A termofeszültséget általában 2 cm hosszúságú drótdarabokon mértük, etalonként pedig egy viszonylag tiszta, de még nem törekenyre hőkezelt próbatestet alkalmaztunk. Szobahőmérséklettől eltérő hőmérsékleteken úgy mértünk, hogy a 3. ábrán látható berendezést egy fűthető réz edénybe helyeztük, amelyet még termoszba, folyékony nitrogén gőze fölé is tehattunk. Ez utób-

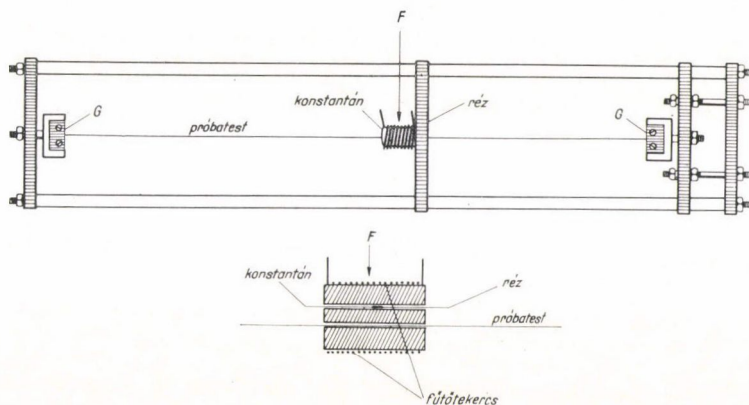
bi mérések pontossága természetesen kisebb volt (lásd 8a ábra)

A volfrám huzalok inhomogenitásainak mérésére érzékenyebb és gyorsabb módszer volt a 4. ábrán látható berendezés alkalmazása. Itt a huzalokon egy kis kétlyukú kerámia fűtőtestet (F) mozgattunk. Az egyik lyukban a vizsgálandó huzal vezetett keresztül, a másikban pedig réz-konstantán termoelem volt, amely a hőmérsékletet mérte. A fűtőtestet melegítve annak két oldalán a huzalon ellentétes irányú hőmérséklet-gradiens alakult ki, így azon szakaszok közti termofeszültség-különbséget közvetlenül lehetett mérni a huzal két végéről a galvanométerhez vezető réz huzalokon keresztül. A fűtőtest viszonylag kis tömege miatt a volfrám huzalt viszonylag gyorsan végig lehetett mérni, és a parazita termofeszültségek is elhanyagolhatóak voltak. A módszer hátránya viszont, hogy az inhomogenitásokat nem abszolút skálán adja meg, hanem különböző drótszakaszokhoz viszonyítva.

Az ún. „elektromos sűrűség” méréséhez az elektromos ellenálláson kívül hossz és tömeg, valamint összehasonlításként néhány hidrosztatikai sűrűségmérésre is szükség volt. Ezen próbatesteken az ellenállásméréshez használt potenciál-vezetékek



közötti hosszat katetométerrel mértük, majd levágva analitikai mérlegén mértük a tömeget. A levágás miatt mikroszkóppal hosszkorrekciót is végeztünk. Hidrosztatikai sűrűségmérésnél a próbatestet 50  $\mu$ -os nikkel huzalon lógattuk bele a desztillált vízbe, és korrekciót végeztünk a szobahőmérséklet változásaira és a felületi feszültségre. Ez utóbbinak a bizonytalanságai azonban meghaladták a 0,1 mg-ot, így a 0,1 % körüli mérési pontosság elérésére legalább 2 g-os mintákra volt szükség a volfrám nagy sűrűsége (25 °C-on 19,254; [37]) miatt.



4. ábra. Huzalok hosszmenti inhomogenitásainak mérésére szolgáló termofeszültség-mérő berendezés [65].

### 3. A mérések kiértékelése és ennek hibái

Vékony volfrám huzalokon az alakfaktor mérését nem lehetett az ellenállás-mérés pontosságával elvégezni, ezért a többletellenállás helyett az ellenállás-hányadosokból (5) alapján számított  $\delta$  értékeket alkalmaztuk (etalonként általában kiizzított E huzalt vettünk)  $\delta$  mérési pontossága folyékony héliumban és folyékony nitrogénben a legnagyobb, ekkor a mérési hiba  $10^{-4}$  vagy kisebb. Magasabb hőmérsékleteken  $\delta$  mérésének pontossága csökken, de ez csak részben adódik a beállított hőmérsékletek inhomogenitásából, nagyobb hibát ad, hogy ilyenkor (5)-ben hasonló nagyságú mennyiségek kívánásából kell  $\delta$ -t kiszámítani. Zárt lámpáknál a mérési hibát növeli, hogy rosszabb volt a hőátadás, kisebb a mérőáram (főleg vákuum-lámpáknál), sőt a hozzávezetések, és bizonyos lámpáknál a kimerítő tartók bizonytalan érintkezéséből is jelentős hiba származhatott.

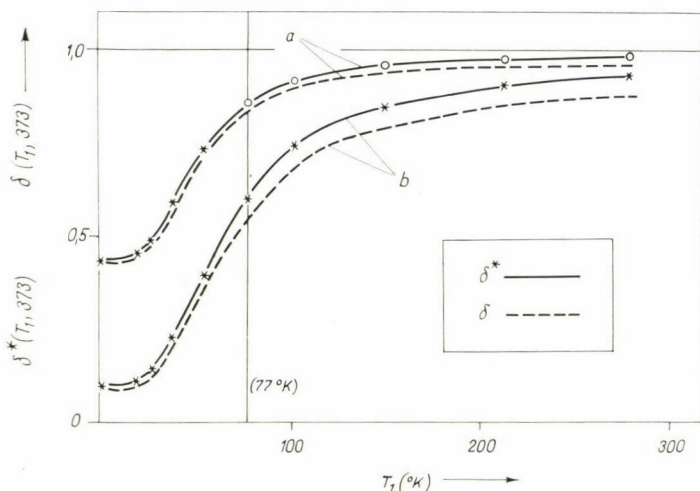
A termofeszültség mérések reprodukálhatósága szobahőmérsékleten kb. 0,01  $\mu\text{V}/^\circ\text{C}$  volt, de erősebben inhomogén huzaloknál az is növelte a hibát, hogy a huzalt 1–2 mm-rel elmozdítva az átlagos koncentráció sokat változott a mért kb. 2 cm-es szakaszon. A termofeszültség-mérések célja elsősorban az  $S_{xe}$  relatív karakterisztikus termofeszültségek kiszámítása volt, ennek hibájába (14) alapján természetesen  $\delta$  hibája is beleszámított.

A közvetlen mérési hibáknál azonban nagyobb problémát okozott, hogy az ellenállás-hányadosokból (5) alapján számított  $\delta$  értékek csak az MSZ érvényessége

esetén arányosak a többletellenállással. Ha ugyanis  $\varrho'_x$  hőmérsékletfüggő, akkor vezessük be (5) jobboldalára a

$$\delta^*(T_1, T_2) = \frac{\varrho'_x(T_1)}{\varrho_e(T_2)} \quad (15)$$

jelölést és mondhatjuk, hogy  $\delta$  és  $\delta^*$  csak az MSz érvényessége esetén fog egymással megegyezni. Minthogy csak  $\delta$  mérésére van mód, meg kell vizsgálnunk, hogy a MSz-tól való eltérések esetén milyen eltérések lesznek  $\delta$  és  $\delta^*$  között. (Megjegyezzük itt, hogy az ellenállás hőmérsékleti tényezőjének mérése ekvivalens  $\delta$  meghatározásával.) Az (5) képlet egyik hibája, hogy a lineáris eltéréseket a MSz-tól gya-



5. ábra.  $\delta^*$  és  $\delta$  hőmérsékletfüggésének összehasonlítása (6) alapján egy inhomogén (a) és egy nagyon inhomogén (b) huzal adataival.

korlatilag nem veszi figyelembe, így annak elhanyagolása miatt szobahőmérséklet körül  $\delta$  értékben néhány százaléknyi szisztematikus hibára számíthatunk. Ezt a hibát csak az alakfaktor igen pontos mérésével szüntethetnénk meg, ugyanis a volfrámban szokásos szennyező koncentrációk esetén az alakfaktor mérésében elkövetett kb. 0,1 %-os hiba szintén kb.  $10^{-4}/^\circ\text{C}$  nagyságrendű lineáris hibát okozna a többletellenállásban.

Előnyösebb a helyzet az MSz-tól való olyan eltéréseknél, amikor a többletellenállás magas hőmérsékleten egy állandó határérték felé tart (általában kb.  $1/T$ -vel). Ez igen gyakori eset, ilyen pl. a (6) egyenletnek megfelelő hőmérsékletfüggés is, és ezt a következő képlettel közelíthetjük:

$$\frac{\varrho'_x(T_1)}{\varrho'_x(\infty)} = \frac{\delta^*(T_1, T_2)}{\delta^*(\infty, T_2)} \approx 1 - \frac{\varepsilon}{\varrho_e(T_1)} \quad (16)$$

ahol  $\varepsilon$  egy az adott rendszerre jellemző,  $T$ -től független érték. Az MSz-tól való eltérés konkrét alakját ismerve, kiszámíthatjuk azt is, hogy az ellenállás-hányadosokból (5) alapján számított  $\delta$ -nak milyen a hőmérséklet-függése. Minthogy a vizsgált



hőmérséklettartományban a volfrám több szennyezője és rácshibája által okozott többletellenállás  $T$ -függése közelítőleg leírható egy (6) típusú egyenlettel, ezért a (6) egyenletet illesztve hozzájuk megfelelő paraméterekkel, az 5. ábrán bemutatjuk  $\delta^*$  (folytonos vonal) és  $\delta$  (szaggatott vonal) függését  $T_1$ -től ( $T_2=373$  K-nél). Az  $a$  görbék megfelelnek az izzólámpa célra készült kb. 50 ppm vasat tartalmazó hőkezelt huzalok adatainak, a  $b$  görbék pedig a kívülről utólag nagyon inhomogén módon szennyezett kb. 150 ppm vasat tartalmazó huzalokénak. Az ábra alapján látható, hogy  $\delta^*$  és  $\delta$  között az eltérés alacsony hőmérsékleten a legkisebb, de porkohászati huzalokon ( $a$  eset) szobahőmérséklet körül is csak 2% körül van.

Általában vita tárgyát képezheti, hogy fizikailag a magas vagy az alacsony hőmérsékleti többletellenállás-adatok érdekesebbek-e. Ha viszont a (6) egyenletnek megfelelő hőmérsékletfüggést az inhomogén szennyező-, vagy rácshibaeloszlás okozza (mint ez volframnál gyakori eset), akkor kétségtelenül csak a magas hőmérsékleti többletellenállásnak van fizikailag értelme, ugyanis csak ez független a szennyező-eloszlástól, és így csak ez lehet jellemző azok fizikai tulajdonságaira. Ebben az esetben tehát az 5. ábrán az  $a$  és  $b$  görbéknek az 1-től való eltérése adja a hibát, amely igen nagyra látszik a  $b$  görbék esetében. A  $b$  görbéket azonban csak a karakterisztikus termofeszültség meghatározása céljából vettük fel, így a hibánál a termofeszültség méréséből származó hibát is figyelembe kell vennünk. Inhomogén szennyező eloszlásnál a párhuzamos vezetőkre vonatkozó Kirchhoff-törvény és (11) alapján felírhatjuk a termofeszültséget [(12)-höz hasonlóan], és az MSz-t homogén szennyezőeloszlásnál érvényesnek tekintve a magas hőmérsékletű határesetben kapjuk:

$$\frac{\Delta S_{\text{inh}}}{\Delta S_{\text{hom}}} \approx 1 - \frac{2\varepsilon}{\varrho_e(T)} \quad (17)$$

ahol  $\Delta S_{\text{inh}}$  és  $\Delta S_{\text{hom}}$  az inhomogén, ill. homogén vezetőkben mérhető termofeszültségek,  $\varepsilon$  pedig a (16) képletben szereplő állandó. (16) és (17) alapján tehát azt láthatjuk, hogy ha célunk a karakterisztikus termofeszültség meghatározása, akkor a termofeszültség és az ellenállás hibái egymás hatását csökkentik. Minthogy a termofeszültség mérésének hőmérséklete 310 K volt általában, és  $T_1$ -et ennél kisebbre kellett választani, így a hibák egymást még jobban kiejtik (az optimum kb.  $T_1=250$  K-nél van). Más hőmérsékleteken csak kevésbé inhomogén szennyező-eloszlásnál végeztünk méréseket, ahol az MSz-tól való eltérések jelentős része nem inhomogenitásból származik.

#### IV.

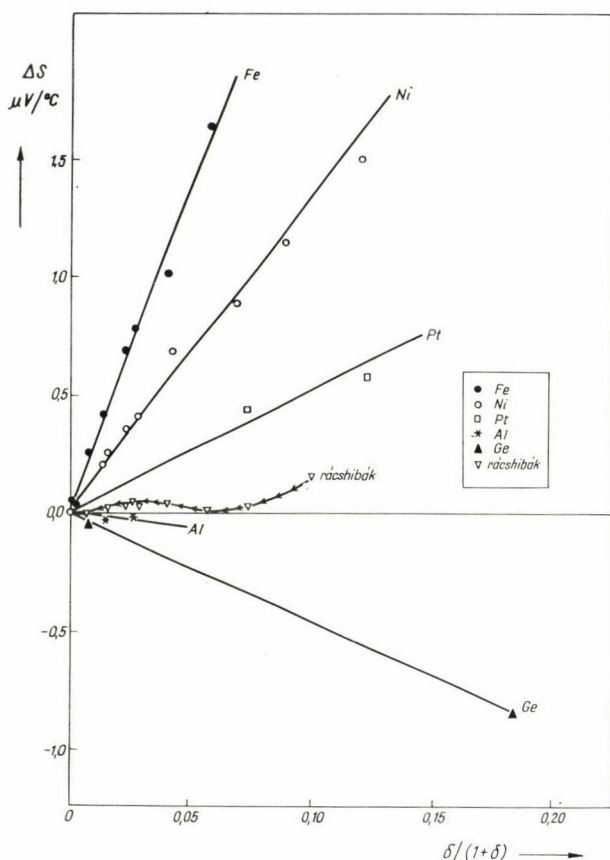
### SZENNYEZŐK ÉS RÁCSHIBÁK HATÁSA A VOLFRÁM ELEKTROMOS TULAJDONSÁGAIRA

#### 1. Oldott szennyezők

A kiindulási anyagként vett E nevű volfrám huzalba (lásd: a III. 2. pontot) különböző szennyezőket diffundáltattunk, és a rajtuk mért  $\Delta S$  értékeket  $\delta/(1+\delta)$  függvényében ábrázolva az eredményeket a 6. ábra mutatja [7] és [66] alapján. Az itt szereplő kis koncentrációk esetére a NGSz érvényességét mutatja, hogy az egy szennyezőhöz tartozó mérési pontok egy egyenesre esnek. Összehasonlításképpen beraj-

zoltuk a E huzal hőkezelési görbáját is (a 9c ábrából véve). Az egyes szennyezőkre vonatkozó egyenesek meredeksége adja (14) alapján  $S_{xe}$  értékeit, ezeket külön is felsoroljuk a 2. táblázatban.

A 6. ábra és a 2. táblázat alapján láthatjuk, hogy a volfrám különböző oldott szennyezői egymástól általában igen különböző karakterisztikus termofeszültséggel rendelkeznek, sőt ennek még az előjele is különböző lehet. Néhány szennyezőre



6. ábra. Különböző szennyezők és rácshibák hatása volfrám termofeszültségére és elektromos ellenállására. Az egyenesek meredekségei az illető szennyezők karakterisztikus termofeszültségét,  $S_{xe}$ -t adja 310 K-en.

ez a karakterisztikus termofeszültség igen nagy (pl. Fe és Ni), és ezekre (11) alapján azt mondhatjuk, hogy az elektronok szórása egyes szennyező atomokon erősen energiafüggő (ilyet várhatunk pl. Kondo-effektusnál). Ha több szennyező fajta is van jelen egyidejűleg, akkor elég kis koncentrációk esetén azok hatása a 6. ábrán vektorálisan adódna össze. Ilyen összegezést mutat a „rácshibák” feliratú görbe,



amely a húzott drótban levő különböző rácshiba-fajták együttes hatását mutatja a hőkezelés előrehaladása során.

Az egyes szennyezők karakterisztikus termofeszültségei közti nagy különbségek lehetőséget nyújtanak arra, hogy elektromos ellenállás és termofeszültség egyidejű mérésével a szennyezőket minőségileg is megkülönböztessük, ami kedvező esetben (pl. ha csak kétféle szennyező van jelen) minőségi és mennyiségi analízist is jelent egyszerre. A szennyező fajták ilyen szétválasztása különösen akkor válik hatásossá, ha nagy és kis karakterisztikus termofeszültségű szennyezőket kell egymástól megkülönböztetni, vagyis ha szórási tulajdonságaik alapján kell őket szétválasztani.

A fentiek alkalmazásaként le-mértük a termofeszültséget és elektromos ellenállást a rendelkezésünkre álló különböző volfrám huzalokon (2800 K-en 15 p-ig vákuumban izzítva), és az eredményeket a 7. ábrán mutatjuk be (l. [7] és [66]).

Összehasonlításként berajzoltuk a 6. ábrából a Fe és Ni szennyezőkre vonatkozó egyeneseket is. Meglepő módon a GK típusú huzalok adatai a Fe egyenese mentén sorakoznak, ami arra utal, hogy ezekben a vas a domináló oldott szennyező. Ez láthatóan általában nem igaz a más technológiával készült huzalokra. A vas domináló szerepe különösnek látszik, ha figyelembe vesszük, hogy milyen sokféle szennyezőt tartalmazhatnak ezek a huzalok (II. 3.). Tudjuk azonban, hogy a szennyezők nagy része szintereléskor kipárolog, egy részük pedig második fázisok alakjában van jelen. A vasnak ezenkívül viszonylag nagyobb a fajlagos hatása (l. táblázat), így a módszer rá valamivel érzékenyebb. A vas ilyen domináló hatását talán azzal is indokolhatnánk, hogy az igen magas szinterelési hőmérsékleten a Fe-nál illékonyabb szennyezők esetleg még a pórusok bezáródása előtt kipárolognak a volfrám rúdból. Ezenkívül vas szennyező felvételére talán még a kovácsolás során is van némi lehetőség.

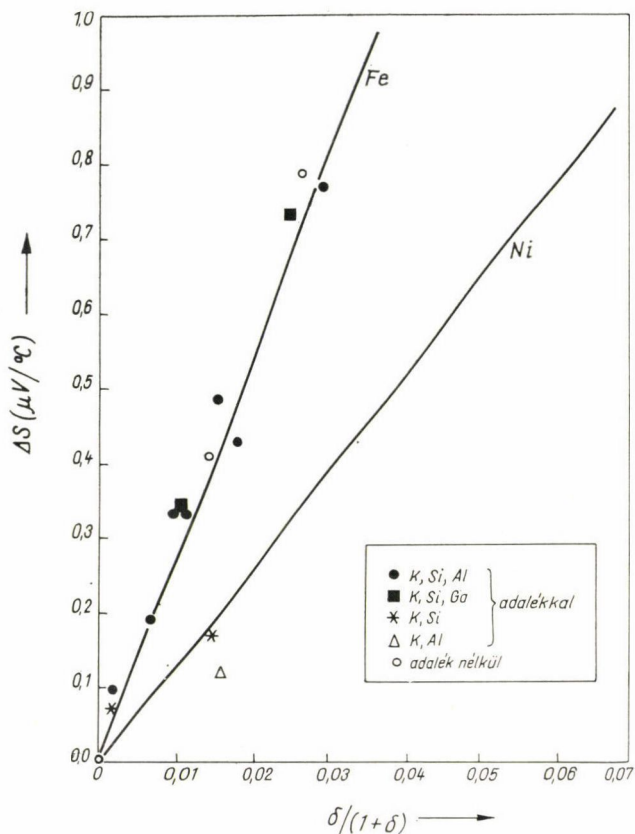
Az oldott vas szennyező igen sok fém-ben Kondo-rendszert alkot, így a volfrámhoz sok tekintetben hasonló viselkedésű Mo-ban is ([67]). Elképzelhető tehát az, hogy a W-ban is Kondo-rendszert képez, és ez megmagyarázná, hogy miért olyan nagy a vas karakterisztikus termofeszültsége volfrám-ban. Ezt a kérdést legjobban mágneses szuszeptibilitás mérésével lehetne eldönteni, de az első tájékozódó mérésekből [68] — főleg ötvöztetési nehézségek miatt — még nem lehet következtetéseket levonni. A Kondo-effektus hatásának jelentkeznie kellene a többletellenállás és a termofeszültség jellegzetes hőmérséklet-függésében is. Ilyen méréseket egyelőre csak a 77 K fölötti hőmérséklet-tartományban végeztünk, ezek eredményeit a 8a és b ábrákon láthatjuk. Az 1. és 2. görbék két kiizzított GK huzalra (kb. 60, ill. 30 súly ppm vas tartalommal) a 3. pedig egy húzott E drótra vonatkozik. (Etalonként egy kiizzított E huzalt vettünk). A többletellenállás alig változik 77 K fölött, 4,2 és 77 K között viszont erősen növekszik a hőmérséklettel. Bár a változás egy

## 2. TÁBLÁZAT

A szennyezők és rácshibák etalonhoz viszonyított karakterisztikus termofeszültségei volfrám-ban, 310 K-en

Oldott szennyező	$s_{xe} (\mu V/^{\circ}C)$
Fe	+27
Ni	+14
Pt	+5
Al	-1
Ge	-5
rácshibák, amelyek eltűnnek kb.	
590 és 860 K között	+7
1000 és 1600 K között	-2
2000 és 2600 K között	+2

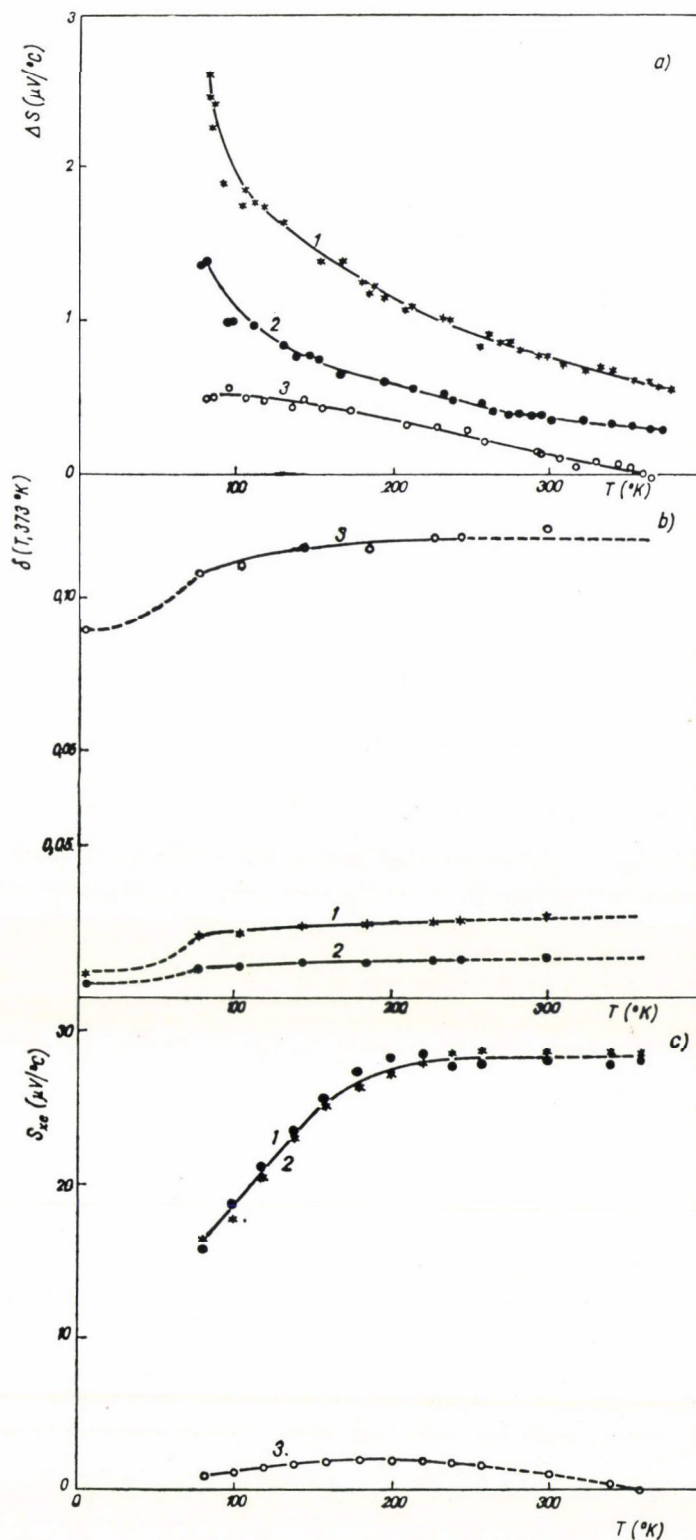
részt az okozza, hogy a vaseloszlás inhomogenitásának hatására 4,2 K-en jelentőssé válik, VI. 4-ben látni fogjuk, hogy homogén próbatesten is jelentkezik  $T$ -vel egy kb. 1,5-szeres növekedés a többletellenállásban, ami Kondo-effektus esetén ferromágneses kölcsönhatásra utal. A termofeszültség alacsony hőmérsékletek felé erősen növekszik, és mivel  $T \rightarrow 0$ -nál zérushoz kell tartania, ezért 77 K alatt maximumnak kell lenni a 2b ábrához hasonlóan. (Teljesen homogén vas eloszlás esetén



7. ábra. Izzított volfrám huzalok Nordheim—Gorter diagramja  
(a 6. ábra Fe és Ni egyenesével együtt).

(17) alapján alacsony hőmérsékleten a termofeszültség valamivel még nagyobb lenne.) Csökkenő hőmérsékletek felé azonban a rácshibák termofeszültsége is növekszik (8a ábra, 3. görbe), így a növekedés ténye egyedül nem bizonyíték a Kondo-effektus mellett. A Kondo-effektusnál a termofeszültség hőmérséklet-függésének alakja erősen koncentrációfüggő, így a 2b ábrával csak úgy hasonlíthatjuk össze a mi esetünket, ha tudjuk, hogy az adott hőmérsékleti tartományban nagy vagy kicsi koncentrációnak számít-e a huzalunkban oldott vas mennyiség. Az 1. és 2. görbék alakja és az, hogy a vas mennyisége csak kb. 50 súly ppm, valószínűsítik, hogy





8. ábra. A termofeszültség (a ábra), a többletellenállás (b ábra), valamint az ezekből számított karakterisztikus termofeszültség (c ábra) hőmérsékletfüggése. Az 1. és 2. görbék 2800 K-en 15 p-ig izzított volfrám huzalokra, kb. 60, ill. 30 súly ppm vas-tartalommal, a 3. görbe pedig húzott E drótra vonatkozik. (Egy 2800 K-en 15 p-ig izzított E huzal volt az etalon).

esetünk a kis koncentrációk esete, így a 2b ábra  $c_1$  görbéjével hasonlítható össze leginkább. Az összehasonlítás azonban mindenképpen nehézkes, így egy koncentrációtól független mennyiség kiszámítására kellett törekednünk. Ezért a 8a és b ábrák adataiból (14) alapján kiszámítottuk az  $S_{xe}$  karakterisztikus termofeszültségeket, és ezeket mutatja a hőmérséklet függvényében a 8c ábra. Itt már az 1. és 2. görbék a mérési hibán belül valóban egybeesnek, és ezeket a 2b ábrán csak a végtelen nagy koncentráció esetével hasonlíthatnánk össze. (A hőmérsékletfüggés vizsgálatánál előnyös, hogy  $S_x$  helyett  $S_{xe}$ -t határoztunk meg, ebben ugyanis első közelítésben kiesik a fonon-szél hatása.) A Kondo-effektus mellett szól az is, hogy a 8c ábrán a vas karakterisztikus termofeszültsége volfrámban nagyságrendileg nagyobb a rácshibák (3. görbe)  $1\text{--}2\text{ }\mu\text{V}/^\circ\text{C}$  karakterisztikus termofeszültségéhez képest (bár ez utóbbi összetett görbe, több rácshiba eredőjeként adódik). A Kondo-effektus tényének, és különösen a Kondo-hőmérsékletének a megállapítására azonban további mérésekre lesz szükség, különösen a  $4,2\text{--}77\text{ K}$  közötti hőmérséklet-tartományban.

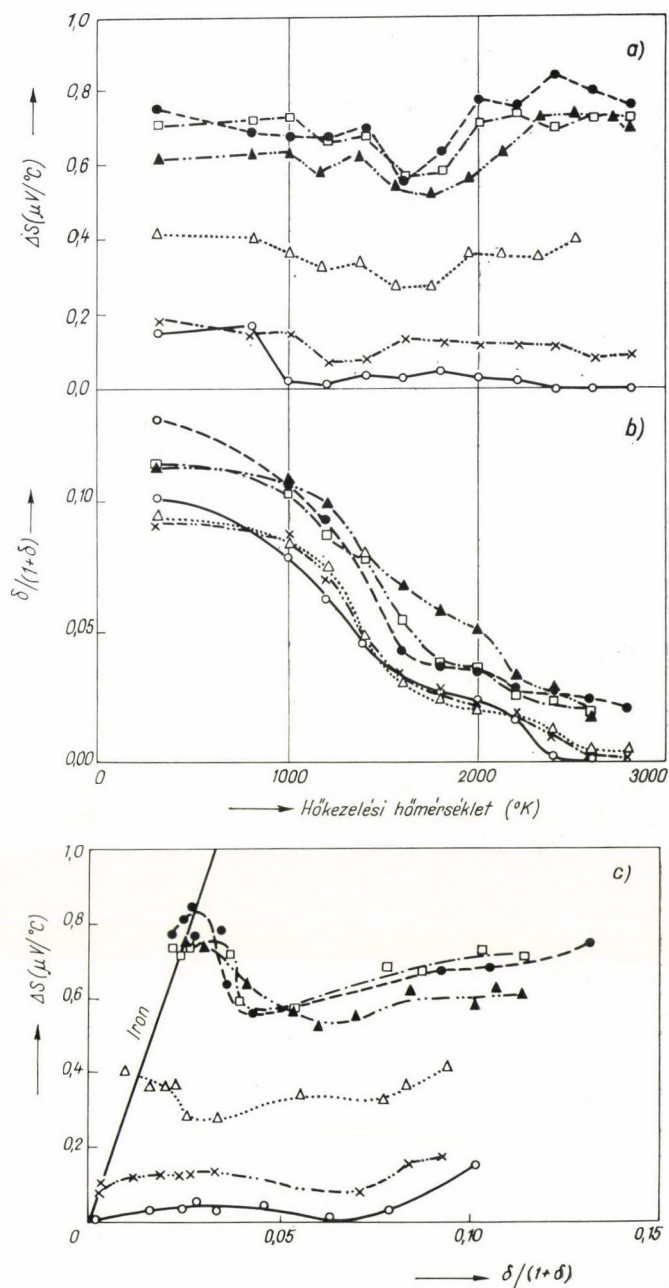
## 2. Rácshibák

Termofeszültség és elektromos ellenállás-mérésekkel nyomon követtük különböző tisztaságú pormetallurgiai volfrám huzalokban a dróthúzás során keletkező rácshibák megújulását is vákuumban történő hőkezelések után [7]. A 9a, ill. b ábrák mutatják a termofeszültséget, ill. a többletellenállást a hőkezelés hőmérsékletének függvényében, a 9c ábra pedig az ezekből összeállított Nordheim—Gorter-diagram. (Itt berajzoltuk a 6. ábra vas egyenesét is összehasonlításképp.) A 9c ábra összeállításánál elhanyagoltuk az MSz-tól való eltéréseket, ez azonban húzott drótokon csak néhány százalék hibát okoz  $77\text{ K}$  fölött.

A többletellenállás változása a hőkezelések során (9b ábra) lényegében megfelel Kovács-Csetényi [61] hasonló huzalokon végzett mérési eredményének, a hőkezelés végén fennmaradó többletellenállás pedig az egyes huzalok vastartalmával arányos. Egészen más képet mutat viszont a termofeszültség változása a hőkezelések során (9a ábra). A különbség főleg abban mutatkozik, hogy a termofeszültségnél az eltérő vastartalom jelentős különbségeket okoz az egyes minták között, a hőkezelések során bekövetkező változások pedig ezeknél a különbségeknél lényegesen kisebbek. Ezt azzal magyarázhatjuk, hogy a vasnak a különböző rácshibákhoz képest kiemelkedően nagy a karakterisztikus termofeszültsége (l. 6. ábra és 2. táblázat).

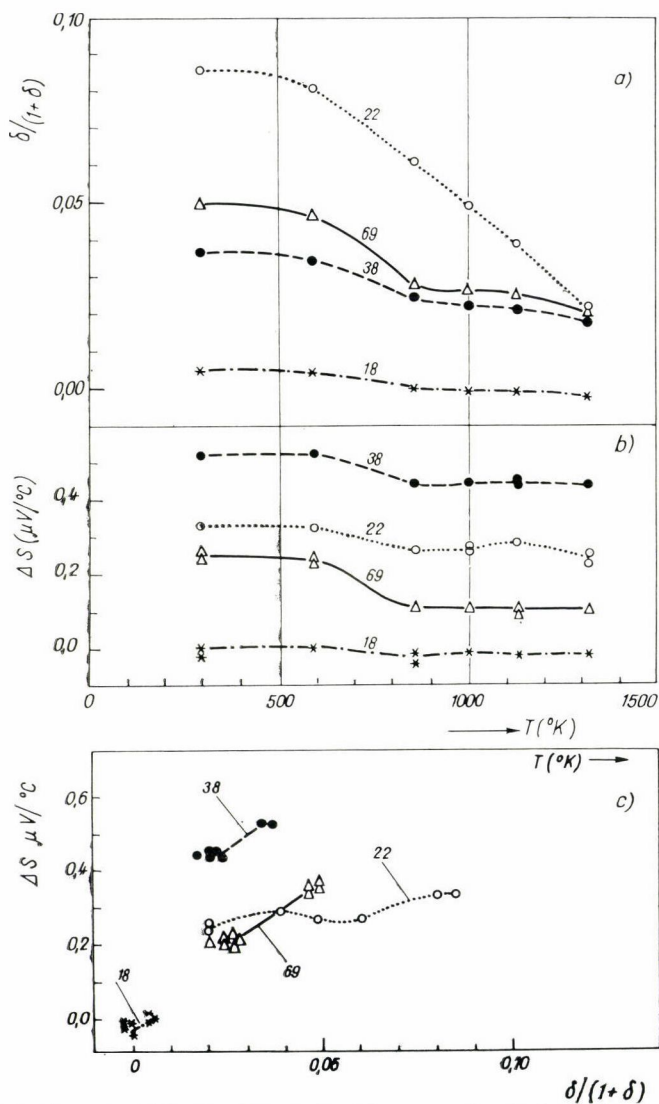
A termofeszültség és ellenállás-mérések együttes alkalmazása itt is új lehetőségeket tár fel. A 9c ábrán ugyanis a görbék meredeksége közelítőleg az egyes hőmérséklettartományokban megújuló rácshibákra jellemző karakterisztikus termofeszültséget adja (bár ebben az esetben a meredekséghez a huzalok vastartalmától függően  $0\text{--}0,8\text{ }\mu\text{V}/^\circ\text{C}$  értéket kell hozzáadnunk, hogy  $S_{xe}$ -t megkaphassuk). Feltűnő, hogy a különböző vastartalmú huzalokra vonatkozó görbék alakja erősen eltér egymástól, ami a vas szerepére utal a megújulási folyamatokban. A nagy vastartalmú huzalokra jellemző, hogy kb.  $1600\text{--}2200\text{ K}$  között erősen növekszik a termofeszültség, ennek a 9c ábrán nagy meredekség felel meg. Ezt a változást a legtriviálisabban az oldott vastartalom növekedésével magyarázhatjuk. Az egyik lehetséges magyarázat erre az, hogy a vas egy része a diszlokációhoz és szemcsehatárokhoz vándorol, majd ezek számának csökkenésével és a hőmérséklet emelkedésével





9. ábra. A hőkezelés hatása a volfrám huzalok (GK típusú) termofeszültségére (a) és elektromos ellenállására (b). Az a és b ábrák adataiból készült a c ábrán látható Nordheim—Gorter diagram [7].

újra oldatba megy. Ehhez viszonylag nagy kötési energiát kell feltételezni a vas, valamint a diszlokációk vagy szemcsehatárok közt. Másik lehetséges magyarázat az, hogy a jelenlevő vasoxid bomlik el, bár kérdéses, hogy a sok más redukáló szennyező és magának a volfrámnak a jelenlétében jelen lehetett-e vasoxid ilyen nagy arányban.



10. ábra. A többletellenállás (a ábra) és a termofeszültség (b ábra) változása csavarással deformált huzalokon a hőkezelés során, valamint az ugyanezen adatokból összeállított Nordheim—Gorter diagram (c ábra). A számok a csavarási deformációt jelzik %-ban. Előzetes hőkezelés vákuumban: 1700 K 15p, kivéve a 22 jelű görbét.



A 9c ábrán a legkevesebb vasat tartalmazó (E) drót görbét fogadhatjuk el tisztán a rácshibákra jellemző görbeként. Ez a hőkezelési görbe három különböző meredekségű szakaszra bomlik, tehát ezeket legalább három különböző típusú rácshiba megújulásának tulajdoníthatjuk. A legnagyobb karakterisztikus termofeszültséget 1000 K alatti hőkezeléseknél találjuk, de a magas húzási hőmérséklet miatt ezt a mérést meg kellett ismételni szobahőmérsékleten csavarással deformált huzalokon is. Ehhez különböző vastartalmú huzalokat előzetesen 1700 K-en 15 p-ig hőkezeltünk, (egy kivételével), majd csavarással deformáltuk elszakadásig. A 10a és b ábrák mutatják  $\Delta S$  és  $\delta(77, 300)$  változásait a hőkezelések során, a %-ban feltüntetett deformációt pedig a következő képletből kaptuk [69]:

$$\gamma = \frac{2 r \theta}{3 l}$$

ahol  $r$  a drót sugara,  $l$  a hossza,  $\theta$  pedig a csavarási szög. Az előzetesen hőkezelt huzalokra az 590—860 K közötti változás közelítőleg arányos a deformációval, és ez a III. lépcső kell, hogy legyen. A III. lépcsőt [1] szerint vakanciák és intersticiósok kölcsönös annihilációja hozza létre, és a 9c ábrán látható Nordheim—Gorter-diagram szerint ezen ponthibák átlagos karakterisztikus termofeszültsége  $+7 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$ . Érdekes, hogy az előzetesen nem hőkezelt huzalnál sokkal kisebb a görbe meredeksége (9c ábra), ami más folyamat jelenlétére utal. Elképzelhető, hogy a dróthúzás hőmérsékletén is mozgékony intersticiósok már előzetesen eltávoztak, és így a vakanciák inkább a nagyobb számban jelenlevő diszlokációkon tűntek el. Ezt magyarázza a hőmérsékletben jobban elnyújtott folyamat, és ebben az esetben azt mondhatjuk, hogy a vakanciák termofeszültsége egész kicsi, az intersticiósoké viszont nagy (talán  $+14 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$  fölötti). Ez a feltevés természetesen még további bizonyításra szorul.

Kb. 1000—1600 K közötti hőkezelések után mérve a meredekség a Nordheim—Gorter-diagramon negatívvá válik (kb.  $-2 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$ , 9c ábra). Ez a IV. és V. lépcső tartománya, itt távoznak a diszlokációk, és itt történik a primér rekristallizáció. Eszerint a diszlokációk kis negatív karakterisztikus termofeszültséggel rendelkeznek. Érdeemes megjegyezni, hogy a mérési hőmérsékleten  $S_e \approx +2 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$ , tehát a diszlokációkra  $S_x \approx 0 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$ , abszolút skálán így a diszlokációk karakterisztikus termofeszültsége kb. zérus.

Újra pozitívvá válik a meredekség kb. 2000 K fölött ( $+2 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$ ), és itt történik a másodlagos újrakristályosodás is (VI. lépcső). Hogy valóban a szemcsehatárok eltűnése okozta ezt az ellenállás-lépcsőt, ezt a következő érveléssel igazoltuk: Ezen lépcső előtt a volfrámban jelenlevő szemcsehatárok távolsága egymástól néhány mikron [70], [71], és ha feltételezzük, hogy a szemcsehatárok a huzal felületéhez hasonlóan szórják az elektronokat, akkor a „size effect” (7) képlete alapján megbecsülhetjük a többletellenállást. Az izzítás során ezen szemcsehatárok eltűnnek, és GK huzalokban az egész huzalátmérőt kitöltő nagy szemcsék jelennek meg. Ennek során tehát ellenállás-csökkenésnek kell fellépni, és a 9b ábrán a 2000 K föltött látható lépcső magassága nagyságrendileg meg is egyezik a szemcsehatárok „size effect”-ből számított többletellenállásával [72]. Ezek alapján tehát azt mondhatjuk, hogy a szemcsehatárok karakterisztikus termofeszültsége kb.  $+2 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$ .

### 3.A második fázisok

Korábban láttuk, hogy a pormetallurgiai volfrám huzalok tulajdonságaiban milyen nagy szerepet töltenek be a jelenlevő második fázisok (II. 3.). A második fázisok hatása azonban általában kicsi a fajlagos ellenállásra és különösen a termo-feszültségre, így a volfrám oldott nyomszennyezői mellett aligha mutathatók ki. V. 2.-ben azonban látni fogjuk, hogy vákuumban történő hosszas izzítással a vas, és a volfrám más szennyezői is kipárolognak a volfrámból, mérve tehát az így megtisztított huzal maradékellenállását folyékony héliumban, az eredmény csak a második fázisokra lesz jellemző. Egyelőre 0,17 mm-es E huzalt izzítottunk 3000 K-en 6 óráig, és az elért maradékellenállás kb.  $0,017 \mu\Omega \text{ cm}$  volt, amit pl. (9) alapján 0,3%-nyi 500 Å méretű második fázis jelenlétével lehetne megmagyarázni. (Hasonló nagyságrendűek a 6. ábrán a mérési pontoknak a vas egyenese körüli vízszintes ingadozásai.) Az ilyen mérések azonban nem közvetlenek, ugyanis a hosszas izzítás megváltoztathatja a második fázisok mennyiségét vagy méretét, így csak közvetve ad információt a GK hatást kifejtő második fázisokra. A második fázisok hatása a termofeszültségre valószínűleg még nehezebben mutatható ki, hiszen ezeknél nem várhatunk a vas atomokéhoz hasonlóan energiafüggő szórást.

A második fázisok mennyiségének mérésére alkalmasabbnak látszik a hidrosztatikai sűrűség mérése, ez ugyanis alig érzékeny az igen kis koncentrációban jelenlevő oldott szennyezőkre. Ha az  $s_m$  sűrűségű második fázisok  $c$  térfogati koncentrációban vannak jelen az  $s_w$  sűrűségű volfrám huzalban, akkor az átlagos sűrűség:

$$s = \frac{m}{l \cdot q} = (1 - c)c_w + cs_m = s_w(1 - Hc) \quad (19)$$

ahol  $H = 1 - s_m/s_w$  (a volfrám nagy sűrűsége miatt általában  $s_m \ll s_w$  így  $H \approx 1$ ). Vékony volfrám huzaloknál azonban igen nehéz a sűrűség pontos mérése, ezért helyette az elektromos ellenállás mérése segítségével inkább az ún. „elektromos sűrűség”-et mértük. Az elektromos ellenállás ugyanis a  $c$  koncentrációban jelenlevő, az elektronok szabad úthosszánál nagyobb második fázisok esetén:

$$R = l/q(1 + Kc)q, \quad (20)$$

ahol  $K$  a második fázisok alakjától függő arányossági tényező (hosszirányban elnyújtott második fázisokra  $K \approx 1$ , kereszt irányú lapokra  $K \gg 1$ , gömbökre  $K = 1,5$  [73]).  $R$  és  $l$  közvetlenül is jól mérhető, (5) alapján egy etalonhoz viszonyítva  $q = q_e(1 + \delta)$ ,  $q$  közvetlen mérése helyett pedig mérhetjük a próbatest tömegét, és ekkor (19) és (20) alapján megkapjuk  $X$ -et, az ún. elektromos sűrűséget:

$$X = s_w[1 + (K - H)c] = \frac{Rm}{q_e(1 + \delta) \cdot l^2} \quad (21)$$

$X$  értékét mértük különböző 2800 K-en 15 p-ig izzított volfrám huzalokon [74], és az egyes huzalok között csak 0,5%-nál kisebb különbségeket találtunk, ezzel tehát a  $(K - H)c$  értékek közti különbségeket mértük. Nagyobb különbséget (2,1%-ot), csak egy Th-os adalékú volfrám huzalnál találtunk, így azon és az etalonon mértük a hidrosztatikai sűrűséget is: 18,64, ill. 19,20 g/cm<sup>3</sup>. A fentiek alapján tehát itt  $Hc \approx c \approx 2,9\%$ , és  $K \approx 1,7$ , ez utóbbi közel gömb alakú második fázisoknak felel meg.)



## V.

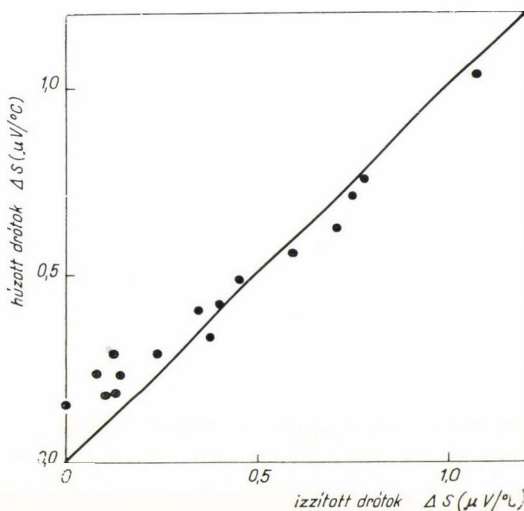
## AZ OLDOTT VAS VISELKEDÉSE VOLFRÁMBAN

## 1. Az oldott vas fajlagos hatása

A 7. ábra alapján korábban már megállapítottuk, hogy a GK típusú izzított volfrám huzalokban a termofeszültség és az elektromos ellenállás közvetlenül az oldott vastartalmat méri (IV. 1.). A termofeszültség ezenkívül csak viszonylag keveset változik a hőkezelések után (az ellenállással ellentétben, l. 9. ábra), és ennek további igazolására a 11. ábrán bemutatjuk a húzott drótok termofeszültségét az izzított huzalok termofeszültsége függvényében. Ennek alapján mondhatjuk, hogy a termofeszültség már a drót húzott állapotában is közelítőleg a vastartalmat méri. A módszer akár gyors ipari kontrollként is alkalmazható, ugyanis a vas mennyisége jellemző a készítés és a szinterelés módjára. Konkrét alkalmazás történt a halogén lámpáknál, ahol a kipárolgó vas mennyisége elegendő ahhoz, hogy a hasznos halogén kör-folyamatokat esetleg lerontsa [9].

A mérés kvantitatív tételére szükség van a vas fajlagos hatásának megállapítására is, mivel nem használhatjuk az 1. táblázat ellentmondónak látszó adatait. Ebből a célból sok huzalon és duplaspirálon végeztünk termofeszültség-mérést több szakaszon, majd megállapítottuk azok kémiai vastartalmát [8]. A termofeszültség méréséhez a következő hőkezeléseket végeztük: 0,17–0,3 mm átm. huzaloknál vákuumban 2800 K-en 15 p. izzítás, a 0,16 mm szálátmérőjű duplaspiráloknál 2700 K-en 15 perces izzítás  $H_2$ -ben, néhány 0,5–1,58 mm átm. huzalnál pedig nem volt külön hőkezelés. Ezenkívül a legnagyobb vastartalmat kívülről bediffundáltatva hoztuk létre. A mérési eredményeket a 12. ábra mutatja.

A méréseinkben szereplő kis koncentrációknál  $\delta$ -t arányosnak vehetjük az oldott vas koncentrációjával, de a termofeszültség helyett a NGSz miatt csak  $\Delta S(1+\delta)$  lesz arányos a koncentrációval, ez szerepel a 12. ábrán is (ez csak néhány % korrekciót jelent, mivel  $\delta \ll 1$ ). A 12. ábrán viszonylag nagy az adatok szóródása, de mérési eredményként az ott legkisebb négyzetek módszerével behúzott egyenes meredekségét fogadjuk el. A mérési hiba meghatározásánál nehézséget jelent, hogy az egyes pontok hibája nem feltétlenül azonos. Ezenkívül a tiszta volfrám termofeszültsége megbecsülhető a 13. ábrából is extrapolációval, és így a zérus pont ismeretében a pontokra  $ax+b$  típusú egyenes helyett elég egy  $ax$  típusú egyenest illesz-



11. ábra. Kb. 0–100 súly ppm közötti vas tartalmú húzott és izzított volfrám huzalok termofeszültségeinek összehasonlítása [8].

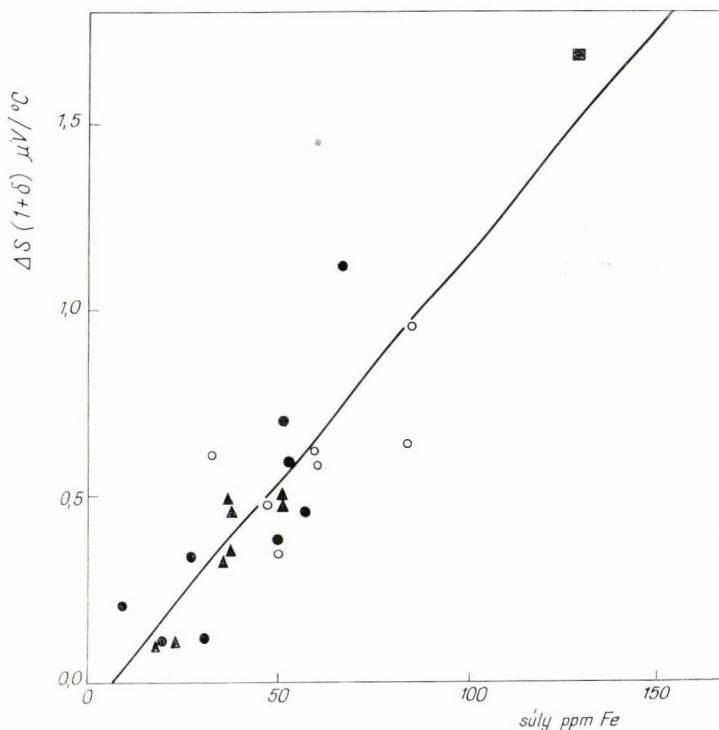
teni, ami a statisztikus kiértékelésből adódó hibát 13%-ról 5%-ra csökkenti. A tényleges szórás valószínűleg e két szélső eset között lehet.

Az oldott vas szennyező hatásaként fogadjuk el a 12. ábrán berajzolt egyenest, eszerint 100 súly ppm oldott vas hatására  $\Delta S(1+\delta) \approx 1,23 \mu\text{V}/^\circ\text{C}$  lesz, és a vas karakterisztikus termofeszültsége alapján (2. táblázat) a többletellenállás  $0,26 \mu\Omega \text{ cm}$ . Számítsuk még át az eredményeket 1 at%-ra, ekkor kapjuk (310 K-en):

$$\Delta S(1+\delta) = 37 \mu\text{V}/^\circ\text{C/at}\%,$$

$$\rho_x = 8 \mu\Omega \text{ cm/at}\%.$$

A hőmérsékletet csökkentve a vas fajlagos hatása az ellenállásra kb. 77 K-ig alig csökken (8b ábra), a termofeszültségre viszont többszörösére növekszik (8a ábra). Mint később látni fogjuk, 4,2 K-nél az eredményeket erősen befolyásolja a vas eloszlásának inhomogenitása, és a homogén eloszlásra becsült érték kb.  $5 \mu\Omega \text{ cm/at}\%$ .

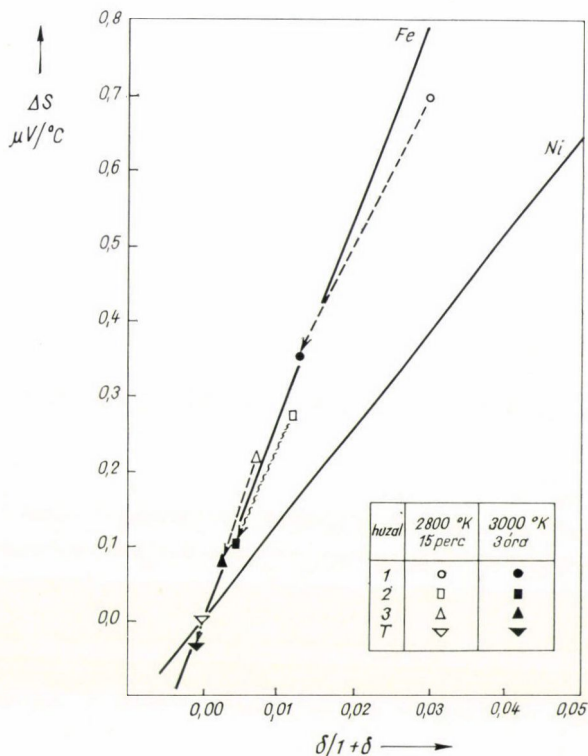


12. ábra. Volfrám huzalok termofeszültsége a vas-tartalom függvényében. ●, ■ 0,17–0,3 mm átm. huzalok, ○ spirálók, ▲ 0,5–1,58 mm átm. huzalok [8].



## 2. A vas diffúziós állandója volfrámban

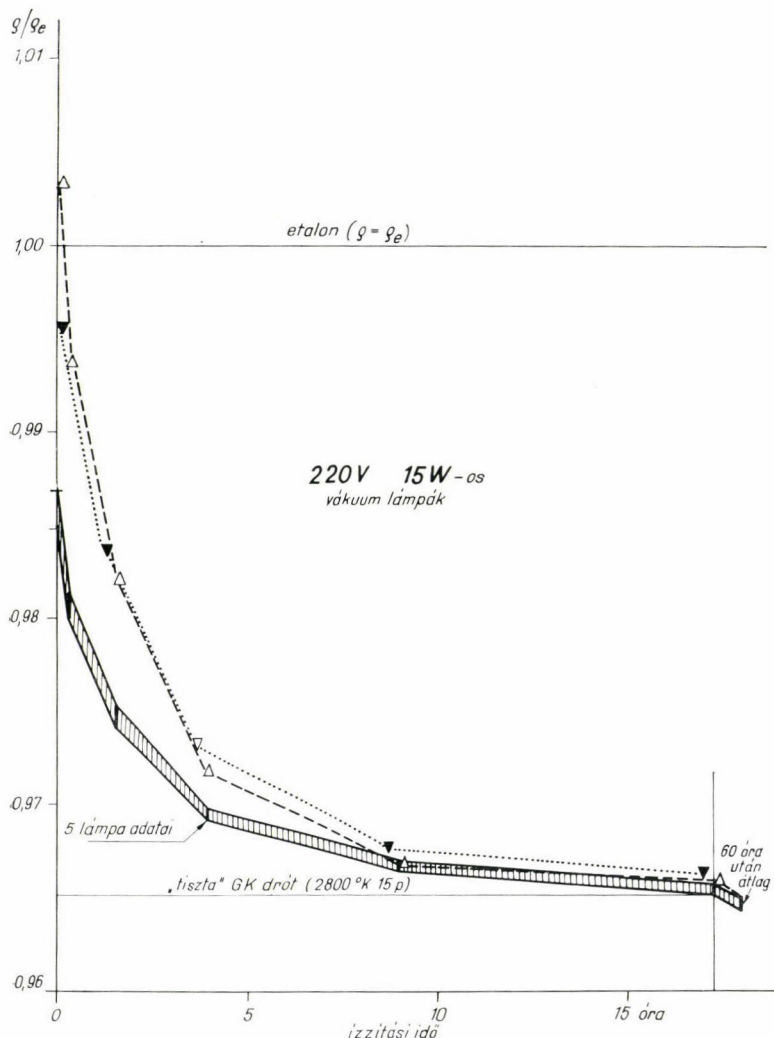
A hosszú izzítások során bekövetkező változások tanulmányozására néhány 0,17 mm átmérőjű GK huzalt vákuumban izzítottunk 2800 K-en 15 percig, valamint 3000 K-en 3 órát. A rajtuk mért  $\Delta S$  értékeket  $\delta/(1+\delta)$  függvényében ábrázolva a 13. ábrán láthatjuk a Fe és Ni egyenesével együtt (a 6. ábráról véve). Az azonos huzalokra vonatkozó adatokat összekötöttük, így látható, hogy a változást a vas kipárolgása okozta ([66] és [75]).



13. ábra. A termofeszültség és többletellenállás változása GK típusú volfrám huzalokban vákuumban történő izzítások után.

Elektromos ellenállás mérésével zárt lámpákon is tanulmányozható a vas kipárolgása az izzószálakból, ugyanis az ellenállás a lámpa feltörése nélkül is mérhető szobahőmérsékleten és folyékony nitrogénben, így egy etalon lámpához viszonyítva  $\delta$  (77, 296 K) meghatározható. Ez látható a 14. ábrán az égetési idő függvényében 7 db 220 V 15 W-os vákuumlámpa izzószálaira (275 V-on égetve). A mérési adatok kb. 60 órai izzítás után a mérés pontosságán belül egybeestek, így ezen adatok átlagát vehetjük kipárolgás utáni határesetnek. Ezen izzószálak szimpla spirálok voltak 14  $\mu$  szálatmérvővel, és az ellenállás-hányadosból mért izzítási hőmérséklet 2480 K volt. Hasonló méréseket végeztünk 17–61  $\mu$  szálatmérvőjű 220–280 V-on

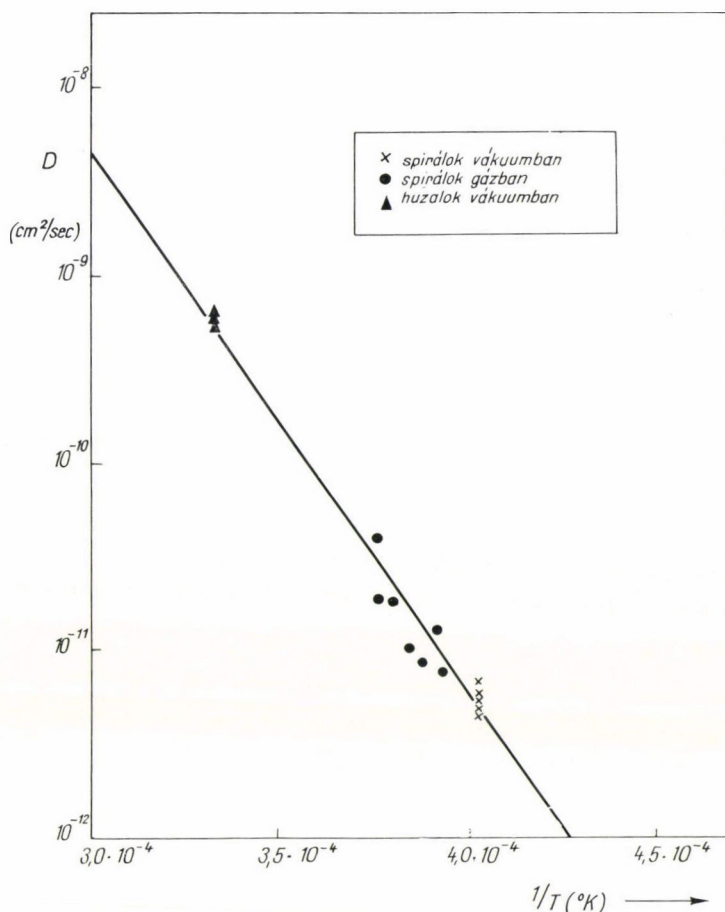
történő izzítások után [75], [76]. A felsorolt mérési eredmények alkalmasak voltak arra is, hogy belőlük meghatározzuk a vas diffúziós állandóját volfrámban. Hengeres huzalokban történő diffúzióra a matematikai számítások [77]-ben találhatók meg, ahol a mérési adatok kiértékelésére megfelelő grafikonok is állnak rendelkezésre. Ezekhez szükség van az adott hőmérsékleten adott idő alatt kipárolgó vas mennyiségének ismeretére, erre szolgálnak az (5) egyenlet alapján meghatározott  $\delta$  értékek. A kiértékeléshez szükség van még egy  $L = a\alpha/D$  dimenziótlan paraméter ismeretére is, amely a kipárolgás sebességére jellemző. Ebben  $a$  a huzal sugara



14. ábra. 220 V 15 W-os vákuumlámpák izzószálai fajlagos ellenállásának csökkenése hosszas égetések során [75].



cm-ben,  $\alpha$  a szennyező egységnyi koncentrációra vonatkozó párolgási sebessége cm/sec-ban, és  $D$  a diffúziós állandó (cm<sup>2</sup>/sec).  $L=0$ -nál a szennyező egyáltalán nem párolog ki,  $L=\infty$ -nél pedig a kipárolgás végtelen gyors a diffúzióhoz képest. Gyakorlatilag ez az utóbbi eset érvényesül  $L>100$  esetén, így a W(Fe) rendszerre is (ott  $L$  értéke  $10^7-10^9$ -re becsülhető). Az így kiszámított diffúziós állandókat a 3. táblázatban soroljuk fel, az izzószállakra vonatkozó adatokkal együtt. A 15. ábrán



15. ábra. Diffúziós állandók a volfrám-vas rendszerben a reciprok hőmérséklet függvényében.

láthatjuk  $\lg D$  értékeit  $1/T$  függvényében ábrázolva ( $T$  K az égetési hőmérséklet), ahol az adatokhoz a legkisebb négyzetek módszerével illesztett egyenest is berajzoltuk. Ez az egyenes a következő diffúziós állandónak felel meg (2480 és 3000 K között):

$$D = 2,1 \cdot \exp \left[ -132 \pm 5 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ deg}^{-1} / RT \right] \text{ cm}^2 \text{ sec}^{-1}.$$

A megadott hiba a statisztikus kiértékelés hibája, a szélső eseteknek kb. 5 és 1 exponenciális előtti tényező felel meg. A Fe diffúziós állandóját W-ban korábban kémiai úton mérték 0,04 súly % Fe koncentrációnál, 2200 és 2800 K között, és  $D = 11,5 \cdot \exp[-140/R \cdot T]$  értéket kaptak [52].

### 3. TÁBLÁZAT

Az izzószálak adatai és a diffúziós állandók

a szál adatai	a szál sugara (a) ( $\mu$ -ban)	hőmérséklet (K-ben)	$D$ (cm <sup>2</sup> /sec) $\cdot 10^{11}$
spirálok vákuumban (7 db)	7	2480	0,5—0,7
duplaspirál gáztöltésnél	9	2540	0,8
duplaspirál gáztöltésnél	12,5	2560	1,3
duplaspirál gáztöltésnél	9	2580	0,9
duplaspirál gáztöltésnél	16	2600	1,0
duplaspirál gáztöltésnél	19	2630	1,8
duplaspirál gáztöltésnél	16	2650	1,9
duplaspirál gáztöltésnél	30,5	2670	4,0
huzalok vákuumban (3 db)	86,5	3000	63, 58, 54

## VI.

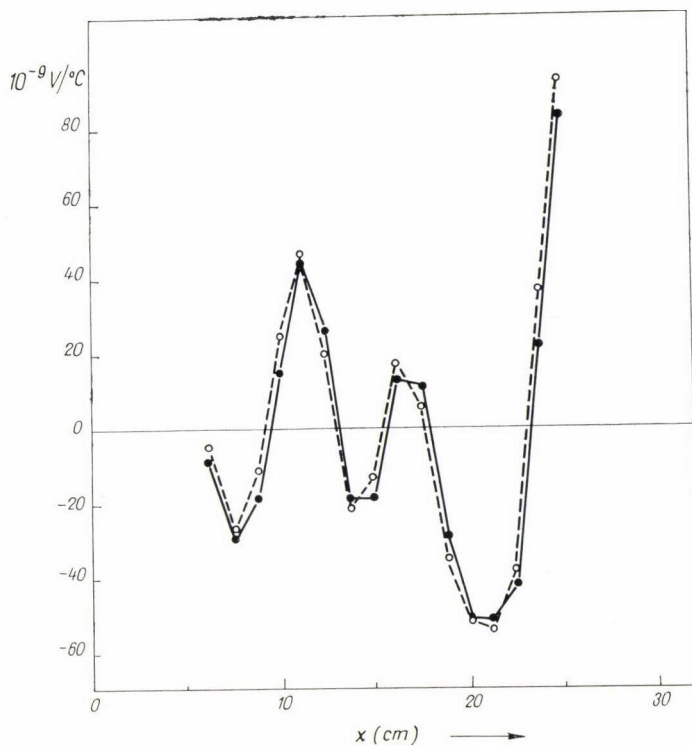
### INHOMOGÉN SZENNYEZŐ-ELOSZLÁS VOLFRÁMBAN

#### 1. Hosszmenti inhomogenitások

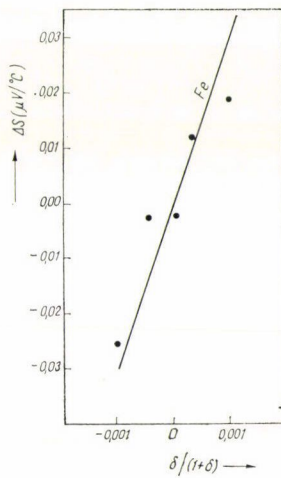
Az inhomogén szennyező-eloszlás a huzal hossza mentén legérzékenyebben és leggyorsabban a 4. ábrán látható eszközzel mérhető. Egy ezzel végzett mérés eredményét és reprodukálhatóságát mutatja a 16. ábra [65]. A mérések egy kb. 50 súly ppm vasat tartalmazó 0,18 mm átm. volfrám huzalon történtek, a megismétlés pedig több nap múlva újra behelyezéssel. Ezek a mért értékek azonban nem közvetlenül érzékenyek a vastartalomra, mivel csak két egymás utáni szakasz közti különbséget mutatják.

A vas-eloszlás inhomogenitásait megvizsgáltuk a 3. ábrán látható mérőfejjel is. Ehhez is egy kb. 50 súly ppm vastartalmú, de 0,17 mm átmérőjű volfrám huzalt választottunk, és 2800 K-en 15 percig tartó izzítás után mértük 2 cm-es szakaszonként a termofeszültséget ( $\Delta S$ ), majd ugyanezekben a szakaszokban az ellenállást is [ $\delta(77, 300)$ -at]. Az eredményeket a 17. ábra mutatja egy Nordheim—Gorter-diagramon, összehasonlításként berajzolva egy a vas szennyezőnek megfelelő egyenest is. Az adatok láthatóan a vas egyeneséhez közel helyezkednek el, az inhomogenitások tehát a vas-eloszlás egyenetlenségeit mutatják.





16. ábra. A vas-eloszlás inhomogenitása egy volfrám huzal hossza mentén. (A 4. ábrán látható berendezéssel mérve.)



17. ábra. Egy volfrám huzal hosszmenti inhomogenitásai Nordheim-Gorter diagramon vizsgálva. [7]

## 2. Inhomogenitások a huzal és a rúd keresztmetszetében

A volfrám huzalok kereszt irányú inhomogenitásait úgy vizsgáltuk, hogy a huzal egy rétegét elektropolírozással eltávolítottuk, és mértük az elektromos tulajdonságokat polírozás előtt és után. Ezen mérések eredményeit a 4. táblázatban foglaltuk össze, etalonként egy kiizzított E huzalt véve. A keresztmetszetek hányadosát

4. TÁBLÁZAT

Huzalok inhomogenitásai a keresztmetszet mentén

hőkezelés	$\delta$ (77,300) polírozás		$\Delta s$ polírozás		$\frac{q_{\text{pol}}}{q}$	$\delta$ külső	$S_{\text{pol}}$ ( $\mu\text{V}/^\circ\text{C}$ )
			előtt	után			
	előtt	után	$(\mu\text{V}/^\circ\text{C}\text{-ban})$				
GK huzal (kb. 50 ppm vassal)							
—	0,1307	0,1363	0,70	0,78	0,8981	0,0933	14
1200 K 15 p	0,0949	0,0993	0,61	0,65	0,8941	0,0651	9
3000 K 15 p	0,0239	0,0286	0,76	0,88	0,8555	0,0022	26
3000 K 15 p	0,0217	0,0243	0,71	0,77	0,9011	0,0025	23
E huzal							
—	0,1004	0,1016	0,08	0,08	0,7597		
—	0,0995	0,0993	0,10	0,08	0,8560		
—	0,0994	0,0993	0,07	0,06	0,8540		
—	0,1034	0,1031	0,08	0,06	0,8174		

az elektromos ellenállásból számítottuk (kis korrekciót végezve a fajlagos ellenállás változásaira). A táblázatban szerepel még  $\Delta s$  és  $\delta$  változásainak hányadosa ( $S_{pol}$ ), amely a lepolírozott rétegben a karakterisztikus termofeszültségnek tekinthető, valamint a külső rétegben mérhető többletellenállás ( $\delta_{k\ddot{u}ls\ddot{o}}$ ), amelyet a párhuzamos vezetésre vonatkozó Kirchoff-törvényből számíthatunk a következő képletből:

$$\frac{q}{\varrho_e(1+\delta)} = \frac{q_{k\ddot{u}ls\ddot{o}}}{\varrho_e(1+\delta_{k\ddot{u}ls\ddot{o}})} + \frac{q_{pol}}{\varrho_e(1+\delta_{pol})} \quad (22)$$

ahol  $q$  és  $\delta$  a polírozás előtti adatok, a „pol” index polírozás utánra vonatkozik, a „külső” index pedig a huzal lepolírozott külső rétegére számítható adat. Az etalon a 2800 K-en 15 percig izzított E huzal, amelyre az ellenállás-hányados 4,2 K és 300 K között kb. 0,0050.

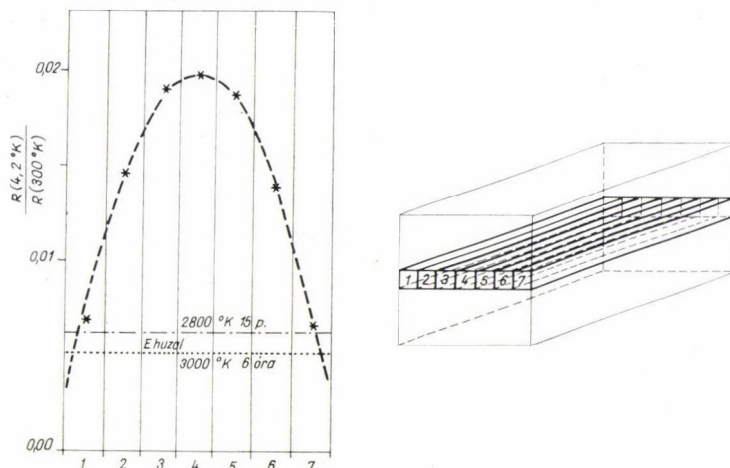
A 4. táblázat alapján megállapíthatjuk, hogy a vasat tartalmazó GK huzal termofeszültsége és fajlagos ellenállása is nőtt a polírozás hatására, és a 3000 K-en izzított huzaloknál ennek egyértelműen az az oka, hogy a vastartalom a felületi rétegben igen kicsi. Hasonló változások voltak a kevésbé izzított huzalok adataiban is, és  $S_{pol}$  viszonylag nagy értékei arra engednek következtetni, hogy ott is elsősorban a vas-tartalom inhomogén eloszlása okozhatta a változást. Ezzel szemben a húzott E drótokban nem mutatkozik szignifikáns változás, a rácshibák inhomogenitása tehát itt nem lehetett jelentős.

Azt, hogy a huzalok felületi rétegében kisebb a vas-tartalom, nem magyarázhatjuk a vas huzalból történő kipárolgásával különösen az 1200 K-en 15 p-ig hő-



kezelt és a hőkezeletlen huzal esetén. Ennek csak az lehet a magyarázata, hogy a huzal deformációja során az egyes felülettel párhuzamos rétegek nem keverednek egymással, lényegében tehát a szinterelt rúdban tapasztalható keresztmetszeti vas-eloszlás marad meg a húzott drótokban is. Ez megfelel annak, amit a húzókövön való áthúzás során bekövetkező képlékeny alakítás folyásviszonyairól gondolunk [78].

A huzalok után ezért is meg kellett vizsgálni a vas szennyező eloszlását egy szinterelt volfrámrúd belsejében is. Ehhez egy  $8 \times 8$  mm-es keresztmetszetű rúd 2 cm-es darabjából a 18. ábrán látható módon 7 hosszirányú szeletet vágunk ki,



18. ábra. A maradékellenállás változása a szinterelt volfrám rúd belsejében. A próbatetek kivágását a mellékelt kép szemlélteti.

majd mértük ezek elektromos ellenállását 4,2 és 300 K-en. Feltételezve, hogy az egyes szeletek azonos vastagságúak voltak, a 18. ábra mutatja az ellenálláshányadosok, vagyis a vas-tartalom eloszlását a keresztmetszet mentén. A berajzolt görbe a 19. ábra  $\sqrt{Dt}/a=0,3$ -nak megfelelő görbéje, egy kis háttér-ellenállás feltételezésével (a pórusokon történő elektronszórásból hasonló háttér várható).

### 3. Az inhomogén vas-eloszlás hatása a MSz-ra

A 16., 17. és 18. ábrák és a 4. táblázat alapján láttuk, hogy a volfrám huzalokban és rudakban mennyire inhomogén a vas szennyező eloszlása. Viszonylag lassan változó hosszmenti inhomogenitások esetén a fajlagos ellenállás a helyi fajlagos ellenállások integrál-átlagát méri, ami az átlagos szennyezőtartalommal arányos többletellenállást jelent, tehát nem okoz eltérést a MSz-tól. Más a helyzet a keresztmetszet mentén fellépő inhomogenitásokkal, ekkor ugyanis a párhuzamos vezetőkre érvényes Kirchoff törvényt kell alkalmaznunk, tehát a vezetőképességek integrál-átlagával kell számolnunk. Ebben az esetben  $a$  sugarú hengeres vezetónél henger-szimmetrikus szennyező-eloszlásnál kapjuk:

$$\varrho_{\text{inh}} = \frac{a^2}{2} \left[ \int_0^a \frac{r dr}{\varrho(r)} \right]^{-1} \quad (23)$$

ahol az „inh” index az inhomogén szennyezőeloszlásra utal. Ha ugyanezt a szennyező-tartalmat homogén módon („hom”) osztanánk el a huzalban, akkor

$$\varrho_{\text{hom}} = \frac{2}{a^2} \int_0^a r \cdot \varrho(r) dr \quad (24)$$

lenne. A Bunyakovszkij—Schwarz-egyenlőtlenség alapján ekkor írhatjuk:

$$1 = \left[ \frac{2}{a^2} \int_0^a r \sqrt{\varrho(r)} \frac{1}{\sqrt{\varrho(r)}} dr \right]^2 \leq \frac{4}{a^4} \int_0^a \frac{r dr}{\varrho(r)} \cdot \int_0^a r \varrho(r) dr = \frac{\varrho_{\text{hom}}}{\varrho_{\text{inh}}} \quad (25)$$

tehát inhomogén szennyező-eloszlásnál mindig kisebb ellenállást mérünk, egyenlőség csak akkor állna fenn, ha a kétféle átlagolás azonos eredményt adna. Ez vagy a homogén szennyező-eloszlás esete, vagy pedig a  $T \rightarrow \infty$  határeset.

Nekünk azonban a többletellenállás hőmérséklet-függésére van szükségünk. Tételezzük fel ehhez, hogy az adott szennyező homogén eloszlása esetén érvényes lenne a MSz, vagyis:

$$\varrho_{\text{hom}}(T) = \varrho_t(T) + \Delta\varrho_h, \quad (26)$$

ahol  $\Delta\varrho_h$  a többletellenállás,  $\varrho_t(T)$  pedig a tiszta huzal  $T$ -től függő fajlagos ellenállása. Inhomogén eloszlásnál a MSz csak az egyes rétegekre külön lesz érvényes:

$$\varrho(r) = \varrho_t(T) + \Delta\varrho(r), \quad (27)$$

ahol  $\Delta\varrho(r)$  a többletellenállás a középvonaltól  $r$  távolságra. Számítások céljára alkalmasabb, ha a hőmérséklet helyett  $u = \varrho_t(T)/\Delta\varrho_h$ -t vezetjük be új paraméterként, így ugyanis az eredmény nem függ a szennyező koncentrációjától.  $u$  monoton függvénye  $T$ -nek, és az  $u=1$  eset azon  $T_0$  hőmérsékletnek felel meg, amelynél a fonon-ellenállás megegyezik a szennyező-ellenállással ( $\Delta\varrho_h$ -val). Jelöljük az inhomogén huzal  $\Delta\varrho_h$  egységeiben mért többletellenállását  $\delta(u)$ -val (vagy  $\delta(T)$ -vel), ekkor

$$\delta(T) = \frac{\varrho_{\text{inh}}(T) - \varrho_t(T)}{\Delta\varrho_h} \quad (28)$$

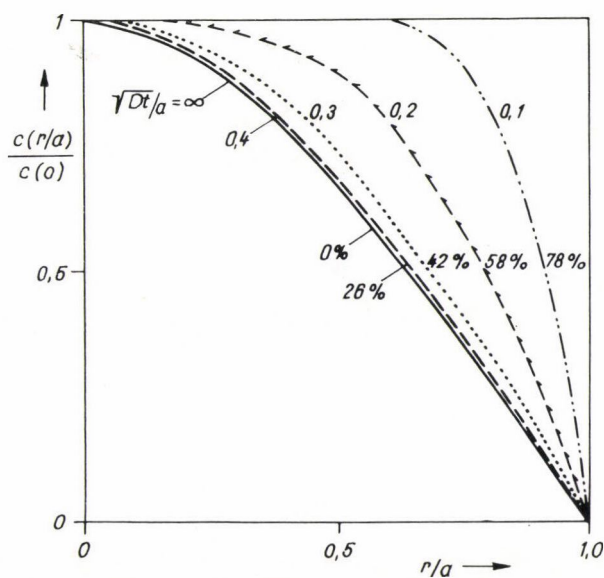
ebből pedig (23) és (27) alapján írható, hogy

$$\delta(u) = \frac{a^2}{2} \left[ \int_0^a \frac{r du}{u + \frac{\Delta\varrho(r)}{\Delta\varrho_h}} \right]^{-1} - u \quad (29)$$

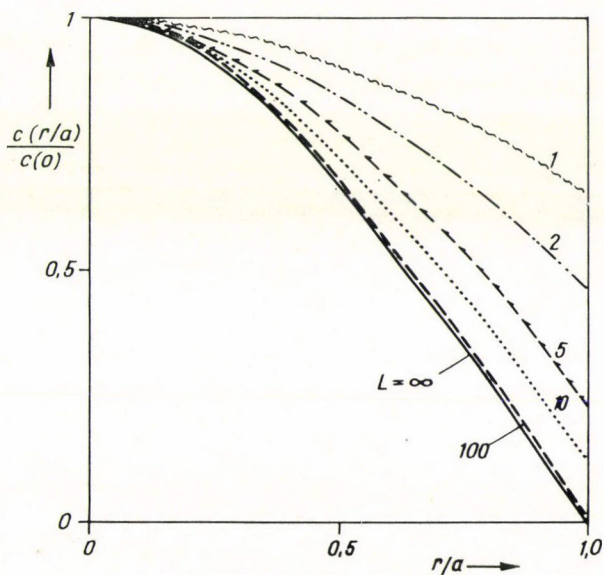
(29)  $u$  szerinti deriválásával kimutatható, hogy  $\delta(u)$  monoton növekvő függvénye  $u$ -nak.

A volfram huzalban izzítás során létrejövő szennyező-eloszlást [77] alapján a 19. és 20. ábrákon mutatjuk be az  $r/a$  relatív sugár függvényében. A 19. ábrán  $\sqrt{D \cdot t/a}$  a változó paraméter  $L = \infty$  mellett (ez tehát az időfüggést adja), a 20. ábrán pedig a  $t \rightarrow \infty$  határesetben láthatjuk az eloszlásokat  $L$  különböző értékeire (amely lényegében attól függ, hogy a szennyező milyen gyorsan párolog a volfrámhoz viszonyítva). Ugyanezen szennyező-eloszlásokra kiszámítottuk  $\delta(u)$ -t is, ennek értékei a 21. és 22. ábrán láthatók. Egy adott szennyezőtartalom esetén a MSz-tól való

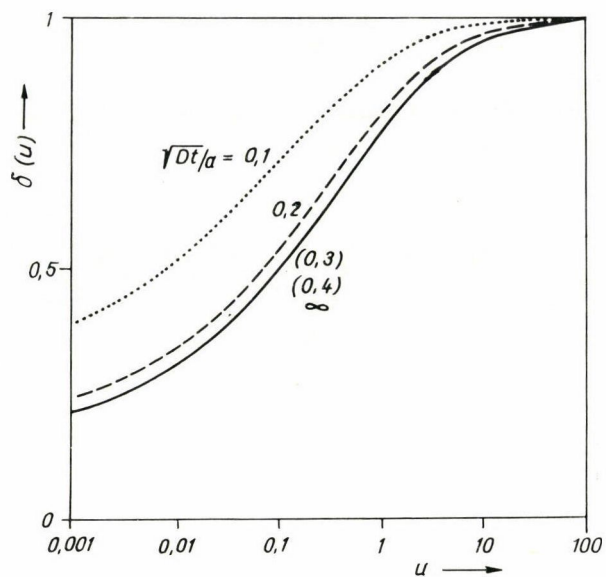




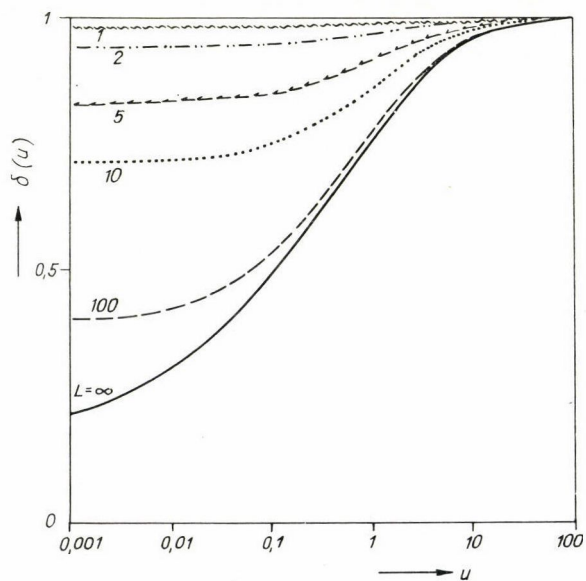
19. ábra. Az oldott szennyező eloszlása a huzal keresztmetszetében különböző ideig tartó izzítások után  $L = \infty$  esetén. ( $\sqrt{Dt}/a$  értékei, valamint a kipárolgás után bennmaradó anyagmennyiség %-a jelezve van a görbéken).



20. ábra. Az oldott szennyező eloszlása a huzal keresztmetszetében  $t \rightarrow \infty$  esetére különböző  $L$  értékekre.



21. ábra. A többletellenállás függése  $u = q_t(T)/\Delta q_h$ -tól a 19. ábrán látható szennyező-eloszlások esetére ( $L = \infty$ -nél).

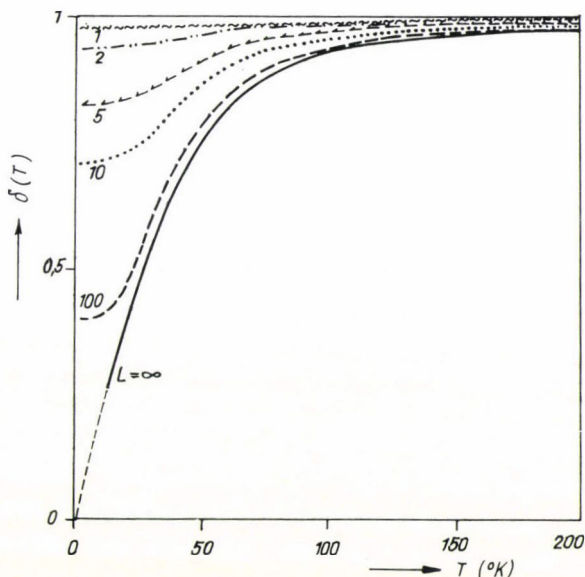


22. ábra. A többletellenállás függése  $u = q_t(T)/\Delta q_h$ -tól a 20. ábrán látható szennyező-eloszlások esetére ( $t \rightarrow \infty$ -nél)



eltérés  $u$ -függésről átszámítható  $T$ -függésre is, és a 22. ábra adatainak megfelelő hőmérsékletfüggést a 23. ábra mutatja kb. 50 súly ppm vastartalom esetére.

A 23. ábrán tűnik ki legjobban az az eredmény, hogy az  $L = \infty$ -nek megfelelő eloszlásnál  $T \rightarrow 0$  esetén  $\delta(T) \rightarrow 0$ , és alacsony hőmérsékleten még az  $L = \infty$  és  $L = 100$ -nak megfelelő görbék is erősen szétválnak egymástól. A megfelelő szennyező-eloszlásokat vizsgálva (20. ábra), erre azt a magyarázatot adhatjuk, hogy  $L = \infty$  esetén a huzal felülete mellett van egy zérus fajlagos ellenállású réteg, amely tehát rövidre zárja a többi réteg vezetését, így zérus eredő ellenállást okoz. A valóságos huzalokban természetesen nem fordulhat elő ilyen szélsőséges eset, ha figyelembe

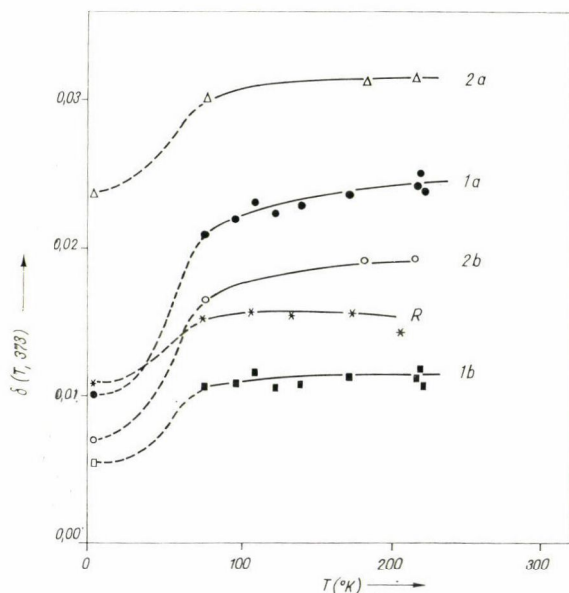


23. ábra. A többletellenállás hőmérséklet-függése a 20. ábrán látható szennyező-eloszlások esetére, kb. 50 súly ppm vasat tartalmazó volfrám huzalokra.

vesszük az elektronok szabad úthosszát ( $\lambda$ -t) is. Nézzük meg ezt a kérdést az esetünkben leggyakrabban előforduló kb.  $90 \mu$  sugarú huzalokon 50 súly ppm vastartalomnál. Ebben az esetben  $T=0$  K-nél a huzal közepén  $\lambda \approx 1 \mu$ , de a tengelytől távolodva  $\lambda$  növekszik. A 20. ábra  $L = \infty$  görbéjét tekintve a huzal felületétől kb.  $10 \mu$ -nyira a kisebb szennyező-tartalom miatt a szabad úthossz már kb.  $10 \mu$ -ra nő, és tovább már nem növekedhet, mert az elektronok ütközés nélkül elhagyják a külső réteget, és vagy a huzal felületén, vagy a belső koncentráltabb rétegekben szóródnak. Így nagyságrendileg azt várhatjuk, hogy a MSz-től való eltérés nem lesz nagyobb, mint az  $L=10$ -nek megfelelő görbe, hiszen annál válik kb.  $10 \mu$ -ná a szabad úthossz a felületen. (Hasonló nagyságrendű eredményt adtak Vicsek [79] számításai lemez esetére, a szabad úthossz pontos számításbavételével.) A szabad úthossz hatása kevésbé érvényesül vastagabb huzaloknál vagy rudaknál, valamint koncentráltabb ötvözeteknél (ahol  $\lambda$  kisebb).

#### 4. Mért eltérések a MSz-től

Az előbb mondottak alapján azt következtethetjük, hogy a vas inhomogén eloszlása kb. 1,5-szeres eltérést okozhat a MSz-től (a szabad úthossz figyelembevételével), kiizzított huzalokon azonban a mért eltérések ennél lényegesen nagyobbak 4,2 K és 200 K között (8b ábra). Ebből arra gondolhatunk, hogy a vas szennyező esetleg még homogén eloszlásnál is mutat eltérést a MSz-től. Ennek a kérdésnek az eldöntésére a 24. ábrán feltüntettük több huzal többlet-ellenállásának a hőmérsékletfüggését kb. 4,2—200 K között. Az 1a, 1b és 2b görbék szekundér rekrisztallizált huzalokra vonatkoznak, ezeknél az ellenállásnövekedés kb. 2,5-szeres. A 2a huzalt csak 2000 K-en hőkezeltük, így a szemcsehatárok háttért jelentenek az inhomogén vaseloszlás mellett. Láthatóan a relatív eltérés a MSz-től itt lényegesen kisebb,



24. ábra. Mért többlet-ellenállások a hőmérséklet függvényében. 1a és 1b: 2800 K 15 p és kb. 3200 K 41 p; 2a és 2b 2000 K és 2800 K 15—15 p izzítások után; R: szinterelt volfrám rúd közepéből vett szelet (a 18. ábrán a 4. sz. szelet).

(kb. 1,3-szoros), itt viszont szerepet játszhatott az is, hogy a szemcsehatárok által okozott eltérés a MSz-től kicsi. Végül az R jelű görbe a 18. ábrán levő középső rúdszelet (4. sz.) ellenállásának hőmérsékletfüggését mutatja. Itt homogén a vaseloszlás, de itt is van pórusháttér (bár az etalonként használt E huzalnak is van). Mindezek alapján azt mondhatjuk, hogy még homogén vas-eloszlás esetén is van kb. 1,5-szeres növekedés a többletellenállásban, aminek oka a vas szennyező szórási tulajdonságaiban keresendő.



$\delta$  meghatározásánál a mérési hiba szobahőmérséklet körül már igen nagy, ilyen kis szennyezőtartalmak esetén nem határozható meg megbízhatóan. Meglehetősen pontos azonban a mérés, ha  $\delta(4,2; 373)$  és  $\delta(77, 373)$  értékeket mérjük, így a 25. ábrán ezen értékek hányadosát mutatjuk be. (A mérési hibát  $\delta(77, 373)$  esetén 0,0001-nek vettük.) Ez a hányados szerepel itt a 24. ábra 2a és 2b jelzésű huzaljaira is, ez utóbbinál a felületi rétegek lepolírozása után is. (Az átmérő az ábrán fel van tüntetve.) Láthatóan a felület lepolírozása erősen csökkenti a MSz-tól való eltérést.

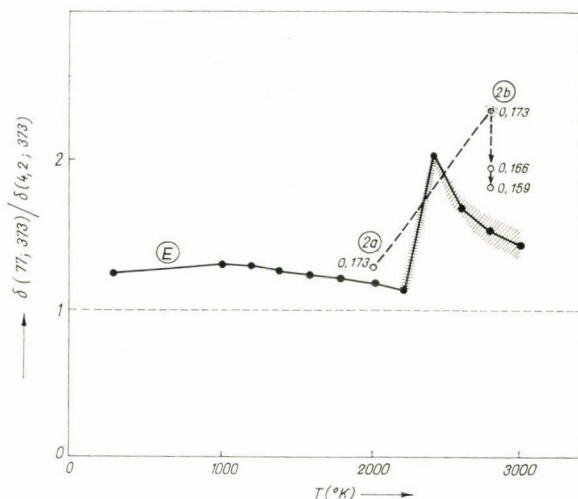
Az E jelű görbe a E huzalunkra mutatja a MSz-tól való eltérést a hőkezelés függvényében, ehhez etalonként egy 3000 K-en 6 órán át izzított E huzalt használtunk. Ez a görbe a rács hibák által okozott eltérést mutatja a MSz-tól, ami 1,13—1,30 között van 2200 K alatt hőkezelt próbatestekre, fölötte viszont (ahol a szekundér rekrisztallizáció végbemegy) igen nagyvá válik, amire a legvalószínűbb magyarázat az, hogy viszonylag nagy térfogatokban egymás mellett léteznek erősen eltérő szemcsehatár-koncentrációjú részek, ami igen nagy inhomogenitást eredményez, így az inhomogén szennyező-eloszlásra mondottak érvényesek. A kiterjedt tartományok miatt a szabad úthossz hatása sem lehet jelentős. Nem kaptunk viszont nagy eltérést a MSz-tól a kb. 1600 K alatt végbemenő primér rekrisztallizáció során, ott ugyanis az 1—2  $\mu$ -os szemcseméreték inhomogenitásai nem érvényesülhetnek a nagy szabad úthossz miatt. 2800—3000 K-en 15 p-ig történő izzítások után a MSz-tól való eltérés újra kisebb, bár itt már túl nagy a mérési hiba. Az itt mért kb. 1,5-szeres eltérés a MSz-tól valószínűleg az E huzalban is jelenlevő néhány ppm vastartalom következménye lehet. (Ehhez viszonyítva ugyanis a második fázis háttér nagyonak számít, mivel az etalonra  $R(4,2\text{ K})/R(373\text{ K})=0,0025$  volt.)

### 5. Ellenállásmérések és az inhomogenitások

Az alacsony olvadáspontú ötvözetek készítésénél a szokásos eljárás az, hogy a fémek megfelelő arányú keverékét összeolvasztják. Magasabb olvadáspontú fémek ötvözeteinél azonban ilyenkor az illékonyabb komponensek elpárolognának, ezért gyakran inkább pormetallurgiai utat választanak (különösen volfrámnál). Az így elkészült ötvözeteket „homogenizáló” hőkezelésnek kell alávetni, amely általában a por összesütésére (szinterelés) is szolgál. A szinterelés és a vákuumban vagy gáz atmoszférában történő hőkezelés azonban általában nem vezet homogén ötvözethez, mert mint láttuk, a felületen történő kipárolgás miatt a kipárolgási profilnak megfelelő szennyező eloszlást kapunk. Túl rövid ideig tartó, vagy alacsony hőmérsékletű szinterelés kell a felületi kipárolgás megakadályozására, ez viszont nem elég a por összesütésére, sőt a belső homogenizálásra sem (felismerhetők lesznek az eredeti porszemcsemérettel összefüggő inhomogenitások). Pusztán hőkezeléssel tehát magas olvadáspontú fémekből általában nem állítható elő homogén ötvözet, és mint láttuk, ez a MSz-tól való jelentős eltérésekhez vezethet. Magas hőmérsékleten (ahol  $q_x \ll q_t(T)$ ) a többletellenállást általában alig befolyásolják ezek az inhomogenitások, alacsony hőmérsékleten viszont (itt elsősorban a gyakran alkalmazott folyékony héliumban történő mérések jönnek szóba) a mért ellenállás erősen eloszlásfüggő lehet. 4,2 K-en történő mérésekhez tehát feltétlenül homogén ötvözetekre van szükség, ilyen nyerhetünk pl. ha az ötvözt gáztérből diffundaltjuk be (pl. halogén körfolyamat segítségével), vagy azáltal is, hogy a szintereléssel

készült rudat erősen levékonyítjuk a felületi rétegek eltávolításával. Ha a 4,2 K-en mért ellenállásban elfogadhatunk 1—2 %-os hibát, akkor a 20. és 22. ábrák alapján elég a rudat kb. fele átmérőre levékonyítani.

Mindezek után térjünk vissza az 1. táblázat adataihoz (137. oldal). A jelen mérés szerint szobahőmérsékleten a vas fajlagos ellenállás járuléka volfrámban  $8 \mu\Omega \text{ cm/at \%}$ , ez megegyezik Van Liempt [52] adatával. 4,2 K-en viszont Schultz [51] mérése szerint a vas hatása  $1,8 \mu\Omega \text{ cm/at \%}$ , ugyanakkor a jelen mérések homogén szennyező eloszlás esetén  $5 \mu\Omega \text{ cm/at \%}$ -ot eredményeztek. Ez az érték azonban inhomogén huzalok esetén leesik  $3 \mu\Omega \text{ cm/at \%}$ -ra, diffúzióval ötvözött és nem homogenizált próbatesteken pedig kb.  $1 \mu\Omega \text{ cm/at \%}$ . [51] adata tehát megfelel az inhomogén szennyező eloszlás esetének, feltehető ezért, hogy a szinterelés során kialakuló inhomogén szennyező eloszlást nem vette figyelembe (dolgozatában ezt nem is említi). Ez a hibaforrás a többi szennyezőre vonatkozó 4,2 K-en mért adatára is fennáll, így ellenőrzés nélkül azokat sem fogadhatjuk el. [53] által 4,2 K-en



25. ábra. A MSz-tól való eltérés relatív nagysága az E, 2a és 2b huzalokon (24. ábra) a hőkezelés hőmérsékletének függvényében, és a 2b huzalon különböző átmérőre (mm-ben) történő polírozások után.

mért értékek még [51] által mérteknél is kisebbek voltak, így lehetséges, hogy esetükben az eloszlás még inhomogénebb volt. Ezek után az 1. táblázatban szereplő 4,2 K-en mért adatokat kétséggel kell fogadnunk, kivételt csak a szén jelent, ezt ugyanis külső atmoszférából vitték be, és a gyors diffúzió (a szén ugyanis intersticiális szennyező) miatt kialakulhatott az egyensúlyi koncentráció.

Az inhomogenitások azonban nemcsak a magas olvadáspontú fémek sajátosságai, hiszen pl. rekristallizáció során minden fémnél inhomogén szemcsehatáreloszlás alakulhat ki, és ez a 25. ábrán láthatóhoz hasonlóan nagy eltéréseket okozhat a MSz-tól. A szemcsehatár-ellenállás mérését általában nem ilyen kirívóan inhomogén szemcsehatáreloszlásnál végzik, de az inhomogenitások hatása már



akkor is jelentős lehet, ha 3—4-szeres eltérések vannak a szemcsék méretében. Teljesen diffúz szemcsehatárszórás feltételezésével belátható, hogy a hiba alacsony hőmérsékleten, tiszta anyagban jelentkezik, és ilyenkor a tényleges szemcsehatár-ellenállásnál a szemcseméret-eloszlástól függő mértékben kisebb ellenállást mérünk. [80] foglalkozott 4,2 K-en végzett szemcsehatár-ellenállás mérésekkel, és  $R(300)/R(4,2) \approx 1900$ , ill. 7000-nek megfelelő alaptisztaságú alumíniumban a kb.  $1-10 \text{ mm}^2/\text{mm}^3$  szemcsehatár-sűrűség tartományban úgy találta, hogy a nagyobb tisztaságú fémekben a szemcsehatár-ellenállás kisebb. Ezt azzal magyarázta, hogy a kevésbé tiszta anyagban a szennyezők feldúsulnak a szemcsehatárokon, és ezáltal megnövekszik azok szóróképessége. Nem közli azonban a szemcseméret-eloszlást, pedig egyenetlen szemcseméreteket esetén ugyancsak a nagy tisztaságú fémekben 4,2 K-en mért szemcsehatár-ellenállás lenne kisebb. Az inhomogenitásból eredő hiba ellenőrizhető lenne, ha magasabb hőmérsékleten (pl. 77 K-en) is végzett volna méréseket.

Inhomogenitások előfordulhatnak más esetekben is, így pl. diszlokációk eloszlásában vagy pl. ha valamilyen ponthibák elnyelődnek vagy feldúsulnak a szemcsehatároknál, és így ezek környezetében megváltozik a koncentrációjuk. Ugyanígy ha precipitálódási folyamatokat vizsgálunk, általában inhomogén lesz a második fázisok méret és távolság szerinti eloszlása, valamint a köztük levő oldat koncentráció-eloszlása. Javítja a körülményeket az a tény, hogy ha az elektronok szabad úthossza lényegesen nagyobb az inhomogenitások kiterjedésénél, úgy azok csak az átlagos szórást érzékelik. Ebben az esetben az inhomogenitások nem is okoznak eltérést az MSz-től [81]. Ha azonban teljesen diffúzan szóró falak vannak jelen inhomogén eloszlásban, akkor az elektronok minden falon szóródnak, így más szórócentrumok hiányában  $T \rightarrow 0 \text{ K}$ -nél a falak távolsága szabja meg a lokális szabad úthosszat, és ez az inhomogenitás mértékétől függő MSz-től való eltéréshez fog vezetni. Ez csak akkor nem állna fenn, ha a falakon való szórás valószínűsége kicsi lenne, így az elektronok szóródás nélkül egyszerre több falon is áthatolnának, tehát az ellenállás alacsony hőmérsékleten is az átlagos szóróképességet mérné.

## VII.

### ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozat célja a pormetallurgiai volfrám huzalokban levő szennyezők és rácshibák tulajdonságainak és viselkedésének tanulmányozása volt elektromos transzporttulajdonságok segítségével. Egyetlen paraméter méréssel csak a szennyezők és rácshibák összes mennyiségére vonhattunk volna le következtetéseket, ezért a vizsgálatoknál két mérést kapcsoltunk össze, a termofeszültséget és a fajlagos elektromos ellenállást, és ezek segítségével minőségi megkülönböztetéseket is el tudtunk érni. A volfrám huzalokba különböző oldott szennyezőket juttatva megállapítottuk, hogy azok karakterisztikus termofeszültsége általában igen különböző. A Fe és Ni különösen kiválnak nagy pozitív karakterisztikus termofeszültségükkel, ami arra utal, hogy ezen szennyező atomok erősen energiafüggő szórással rendelkeznek a volfrámban. Hasonló mérésekkel kimutattuk, hogy GK típusú volfrám huzaljainkban a domináló oldott szennyező a vas.



A módszer igen hasznosnak bizonyult a rácshibák tanulmányozására is, mert lehetővé tette az egyes rácshibatípusok megkülönböztetését, sőt a rácshibák és a vas kölcsönhatására is lehetett következtetni. A volfrám huzalokban jelenlevő második fázisok tanulmányozására az ún. „elektromos sűrűségmérés” segítségével végeztünk méréseket.

Mínthogy a dróthúzás során a termofeszültségben bekövetkező változások kicsik a szokásos vastartalom által okozott termofeszültség-különbségekhez viszonyítva, ezért pusztán termofeszültség-méréssel már húzott drótokban is megbecsülhető a vastartalom. A méréseket kémiai analízissel is összehasonlítottuk, eszerint 310 K-en a vastartalom hatása az elektromos ellenállásra  $8 \mu\Omega \text{ cm/at\%}$ , a termofeszültségre pedig  $37 \mu\text{V}/^\circ\text{C/at\%}$  ( $1 + \delta$ ). A hőmérsékletet csökkentve 77 K-ig, a többletellenállás kb. 10–20%-ot csökken, a termofeszültség viszont többszörösére nőtt. A mért termofeszültség hőmérsékletfüggése azonban függ a koncentrációtól is, ezért célszerűbb helyette a karakterisztikus termofeszültség vizsgálata, amely alacsony-hőmérsékletek felé lassan csökken (200 K körül törés mutatkozik). Az ellenállás hányadosok mérésével huzalok és spirálok hosszas izzítása során nyomon követtük az oldott vastartalom kipárolgását, és ebből meghatároztuk volfrámban a vas diffúziós állandóját is.

Méréseink szerint a volfrám huzalok hossza és különösen a keresztmetszete mentén a vastartalom eloszlása inhomogén. Mínthogy a keresztmetszet mentén fellépő inhomogenitások eltéréseket okozhatnak a MSz-tól, ezért a többletellenállás hőmérsékletfüggésének vizsgálata igen hatásos módszernek bizonyult az inhomogenitások tanulmányozására. Az inhomogenitásokat a szinterelés közben történő vaskipárolgással magyarázhatjuk, s az ebből eredő vaseloszlás valóban nagy eltéréseket okoz a MSz-tól. A ténylegesen mért MSz-tól való eltérések azonban ennél is nagyobbak voltak, a különbséget az oldott vas atomok szórási tulajdonságaiban kell keresnünk. A húzás által keltett rácshibák általában kisebb eltérést okoznak a MSz-tól, a szekundér rekristallizáció során fellépő nagyobb eltérések pedig valószínűleg inhomogén-szemcsehatár-eloszlással magyarázhatók.

Az inhomogenitások által okozott eltérések a MSz-tól azáltal válnak igen fontosakká, hogy ezek alacsony hőmérsékletű (elsősorban 4,2 K) elektromos méréseknél meghamisítják az eredményt, ugyanis az eredmény függeni fog a szennyezők konkrét eloszlásától is. Magas olvadáspontú fémekben az inhomogén szennyező eloszlás kérdése azért nyer különös fontosságot, mert a kipárolgás ténye miatt nem bízhatjuk magunkat a szokásos — vákuumban való magas hőmérsékletű „homogenizáló” izzításokra. Minden fémbe előfordulnak azonban inhomogenitások, pl. a diszlokációk és szemcsehatárok eloszlásában, valamint a precipitálódások során, így ezek nem hagyhatók számításán kívül.

#### IRODALOM

1. H. Schultz, *Mater. Sci. Eng.* 6, 189, 1968.
2. J. Nihoul, *Interstitials and Vacancies in Metals*, Nort-Holland, Amsterdam. 839, 1969.
3. E. Krautz, H. H. Kuhlmann és H. Schultz, *Z. Metallkde*, 59, 133, 1968.
4. W. Kierspe, *Z. Metallkde*, 58, 895, 1967.
5. L. Nordheim, C. J. Gorter, *Physica (Utrecht)* 2, 383, 1935.
6. A. V. Gold, D. K. C. Mac Donald, W. B. Pearson és J. M. Templeton, *Phil. Mag.* 5, 765, 1960.
7. L. Uray, *Phys. Stat. Sol. (a)* 3, 315, 1970.



8. L. Uray és P. Buxbaum, *Acta Techn. Hung.* 74, 329, 1973.
9. Hangos István, Doktori értekezés, 1973.
10. Ch. Kittel, Bevezetés a szilárdtestfizikába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1966.
11. G. T. Meaden, *Electrical Resistance of Metals*, Plenum Press, N. Y. 1965.
12. I. Gaál, L. Uray, *Phys. Stat. Sol.* 29, K 163, 1968.
13. E. Grüneisen, *Ann. Physik*, 16, 530, 1933.
14. A. Matthiessen, *Ann. Physik. Chem. (Pogg Folge)* 110, 190, 1860.
15. J. Bass, *Advances in Physics*, 21, 431, 1972.
16. Z. S. Basinski, J. S. Dugdale és A. Howie, *Phil. Mag.* 8, 1989, 1963.
17. K. H. Berthel, *Phys. Stat. Sol.* 5, 159, 1964.
18. E. H. Sondheimer és A. H. Wilson, *Proc. Roy. Soc. A* 190, 435, 1947.
19. J. M. Ziman, *Phys. Rev.* 121, 1320, 1961.
20. H. Bross és A. Seeger, *J. Chem. Solids*, 4, 161, 1958.
21. T. W. Barbee, R. A. Huggins és W. A. Little, *Phil. Mag.* 14, 255, 1966.
22. E. H. Sondheimer, *Proc. Roy. Soc.* 203, 75, 1950.
23. J. Bass, *Phys. Rev. B*, 7, 898, 1973.
24. J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* 32, 37, 1964.
25. A. J. Heeger, *Solid State Physics* (Ed.: F. Seitz, D. Turnbull és H. Ehrenreich) 23, 283, 1969.
26. K. Fuchs, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 34, 100, 1938.
27. R. B. Dingle, *Proc. Roy. Soc. A* 201, 545, 1950.
28. R. D. Barnard, *Thermoelectricity in Metals and Alloys*. Taylor and Francis LTD, 1972.
29. D. K. C. Mac Donald, *Thermoelectricity*. John Wiley and Sons, N. Y. London, 1962.
30. Landolt—Börnstein, *Zahlenwerte und Funktionen*. Vol. 2. Part. 6. Elektrische Eigenschaften, I. Springer Verlag. 944.
31. M. D. Daybell és W. A. Steyert, *Rev. Mod. Phys.* 40, 380, 1968.
32. F. J. Blatt és W. H. Lücke, *Phil. Mag.* 15, 649, 1967.
33. R. M. Guenault, *J. Phys. F. Metal Physics*. 2, 316, 1972.
34. T. Millner, *A VI. Oszt. Közl.* 21, 243, 1957.
35. T. Millner, *A VI. Oszt. Közl.* 34, 55, 1964.
36. T. Millner, *Acta Techn.* 70, 269, 1971.
37. G. D. Rieck, *Tungsten and its Compounds*. Pergamon Press, Oxford. 1967.
38. G. Agte és J. Vacek, *Wolfram und Molybdaen*. Akademie Verlag, Berlin. 1959.
39. C. J. Smithells, *Tungsten*, Chapman and Hall Ltd. London. 1952.
40. A. Pácz, 1, 410. 499 USA Pat. 1920
41. J. L. Walter, *Trans. Met. Soc. AIME*. 239, 272, 1967.
42. R. C. Koo, *Trans. Met. Soc. AIME*. 239, 1996, 1967.
43. H. G. Sell, D. F. Stein, R. Stickler, A. Joshi és E. Berkeley, *J. of the Institute of Metals*, 100, 275, 1972.
44. O. Kaposi és M. Riedel, *MTA MÜFI Közl. O-11.* 85. 1974.
45. O. Horacek, *Z. Metallkde*, 27, 318, 1974.
46. T. Millner, *MTA MFÜI Közl. O-8.* 7, 1973.
47. R. C. Koo, *Reactive Metals*. Interscience Publishers, 265. p. 1959.
48. R. C. Koo, *J. Less-Common Metals*, 3, 412, 1961.
49. S. Friedman és J. Brett, *Metallurgical Transactions*, 1, 3225, 1970.
50. E. Krautz, H. H. Kuhlmann és H. Schultz, *Z. Metallkde*, 59, 133, 1968.
51. H. Schultz, *Acta Met.* 12, 649, 1964.
52. I. A. M. Van Liempt, *Rec. Trac. Chim. Phys. Bas.* 64, 239, 1945.
53. E. Krautz és H. Schultz, *Techn. Wiss. Abh. D. Osram Gesellschaft. Band 8.* Springer Verlag Berlin—Göttingen—Heidelberg. 259 p. 1958.
54. *ibid.* 225, 1958.
55. W. Geiss és J. A. M. Van Liempt, *Z. Anorg. Ch.* 128, 355, 1923.
56. E. Gebhardt, E. Fromm, U. Roy, *Z. Metallkde*, 57, 732, 1966.
57. G. Hörz és E. Fromm, *Z. Metallkde*, 61, 819, 1970.
58. W. J. Arnoult és R. B. Mc Lellan, *Acta Met.* 21, 1397, 1973.
59. M. W. Thompson, *Phil. Mag.* 5, 278, 1960.
60. H. Schultz, *Acta Met.* 12, 761, 1964.
61. E. Kovács-Csetényi, *Acta Phys.* 18, 11, 1964.
62. I. Langmuir, *General Electric Review*, 30, 310, 1927.
63. W. E. Forsythe és E. Q. Adams, *Astrophysical Journal*, 1937.

64. E. Nagy és J. Tóth, J. Phys. Chem. Solids, 24, 1043, 1963.
65. L. Uray és I. Gaál, Acta Techn. Hung. 65, 139, 1969.
66. L. Uray, Acta Techn. Hung. 78, 435, 1974.
67. H. Claus, Phys. Rev. B. 5, 1134, 1972.
68. Kele András, Szakdolgozat, 1974.
69. E. Nagy, I. Kovács, Realstruktur und Eigenschaften von Reinstoffen, 2. Symposium, 501. 1967.
70. E. Kovács-Csetényi, Acta Phys. 18, 11, 1964.
71. O. Horáček, T. Millner, Z. Metallkde, 58, 345, 1967.
72. L. Uray, I. Gaál, Phys. Stat. Sol. (a) 3, K 123, 1970.
73. Lord Rayleigh, Phil. Mag. 34, 481, 1892.
74. I. Gaál, L. Uray, Phys. Stat. Sol. 29, K 163, 1968.
75. I. Gaál, L. Uray, MTA Műfi Közl. 0-7, 85, 1972.
76. L. Uray, J. M. Neugebauer és I. Gaál, Acta Techn. Hung. 78, 393, 1974.
77. J. Crank, The Mathematics of Diffusion, Clarendon Press, Oxford. 1956.
78. R. Hill, The Mathematical Theory of Plasticity, Oxford, Clarendon Press. 171. o. 1964.
79. T. Vicsek, személyes közlés.
80. M. B. Kasen, Phil. Mag. 21. 599, 1970.
81. T. Gesztli, Phys. Stat. Sol. 35, 793, 1969.





Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1975. november 15. — Terjedelem: 8,05 (A/5) iv  
75-5199 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.

Ára: 10,—Ft  
Előfizetés kötetenként 48,—Ft

INDEX: 26491

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Varga László: g-faktorok mérése perturbált szögeloszlás módszerrel .....</i>	83
<i>Uray László: A volfrám nyomszennyezőinek és rácshibáinak vizsgálata elektromos transzport- tulajdonságok segítségével .....</i>	127



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXIV. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1976

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt irjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetet és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését, a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget irjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# STACIONÁRIUS GRAVITÁCIÓS TEREK TULAJDONSÁGAI\*

PERJÉS ZOLTÁN

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOM

Előszó .....	173
Jelölések .....	175
Bevezetés .....	177
<i>I. rész: Spinorok az általános relativitáselméletben</i> .....	179
1. Spinoralgebra .....	179
2. Spinoranalízis .....	182
3. Görbületi spinor és Petrov-osztályozás .....	183
4. Az általános relativitáselmélet alapvető összefüggéseinek spinoralakja .....	188
5. A spin koefficiensek módszere .....	189
<i>II. rész: Stacionárius gravitációs terek</i> .....	198
1. Alapismeretek .....	198
2. Háromdimenziós „relativitáselmélet” .....	201
3. Invariáns osztályozás .....	204
4. Spinorkalkulus .....	208
5. $SU(2)$ spin koefficiensek .....	212
6. A stacionárius téregyenletek új alakja .....	216
7. Sajátságár .....	219
8. A Kerr-metrika levezetése. A téregyenletek integrálása .....	222
9. Geodetikus sajátugarakkal rendelkező terek .....	226
10. Új megoldások $\sigma \neq 0$ -val .....	230
1. Megoldások $\tau = 0$ -val .....	231
2. Megoldások $\sigma = \gamma$ -val .....	232
<i>III. rész: Elektrovákuum</i> .....	236
1. Alapfogalmak .....	236
2. Stacionárius elektrovákuum .....	237
Összefoglalás .....	242
Köszönetnyilvánítások .....	242
A) Függelék: Az összekötő mennyiségek .....	243
B) Függelék: $[\sigma_{AB}^i]$ mátrixok kommutátorai .....	244
Irodalom .....	245

## ELŐSZÓ

55 éve alkotta meg *Einstein* az általános relativitáselméletet [11]. Az eltelt évek során a tér, idő és gravitáció törvényeit oly bensőségesen egybeötvtöző elmélet *stacionáriusnak* bizonyult: mindmáig változatlan formában érvényesnek ismerjük el.

\* Kandidátusi értekezés, 1971.

E megállapítás inkább ironikus talán, mint matematikus. Kétségtelen mégis, hogy a fizikusok és filozófusok körében az elméletről szüntelenül dúló viták eredményeként ma erősen hiszünk alapelveiben, az ekvivalencia és kovariancia követelményében, valamint a gravitáció és geometria tulajdonságainak egybefonódásában.

A gravitációs egyenletek matematikai részleteit illetően olykor találkozunk még kételyekkel. E disszertáció megírásakor kísérletek folynak a gravitációs egyenletek alakját módosító skalár-tenzorelmélet [6] helyességének ellenőrzésére. Több korábbi, a skalár-tenzorelmélettel kevésbé összeférő kísérleti eredmény közzététele [30, 52, 61] után most *Shapiro* [53] pontosabb mérései ismét az általános relativitáselmélet téregyenleteit látszanak megerősíteni, noha a mérési pontosság még mindig nem elegendő a végleges döntéshez.

Vannak természetesen olyan jelek, amelyek az elmélet alkalmazhatóságának korlátaira utalnak. Mostani formájában az általános relativitáselmélet képes arra, hogy a környezetünkben előforduló gravitációs jelenségeket megmagyarázza. Azt sejtjük azonban, hogy a Természetben előfordulnak rendkívül intenzív és gyorsan változó gravitációs terek. Ilyen tereket produkálhat például a csillagfejlődés során bekövetkező gravitációs kollapszus [19, 29]. A gravitációs egyenleteknek ismeretesek olyan megoldásai, amelyek helyenként erős gravitációs tereket tartalmaznak [10, 45]. Azokban a tartományokban, ahol nagy a térerősség, ezek az egzakt megoldások néha fizikailag elfogadhatatlan következményekre (például kauzalitássértő jelenségekre [7]) vezetnek. Az elmélet bonyolult matematikai struktúrája és az erős terekben alig áttekinthető geometriai viszonyok következtében nehéz megítélni az ilyen fajta problémák súlyosságát. A gravitációelmélet történetében előfordult már, hogy valamely, korábban akutnak minősített probléma az elmélet keretein belül megoldódott tüzetesebb elemzés után. Elég itt arra emlékeztetnünk, hogy sokáig úgy tűnt, elfogadható kozmológiai modellt csak a  $\lambda$  kozmológiai konstans bevezetésével lehet konstruálni az elméletben [12]. Friedman behatóbb vizsgálatai azonban megmutatták [17], hogy a gravitációs egyenletek a kozmologikus tag hozzáfüzése nélkül is ésszerű modellekre vezethetnek.

Nem zárhatjuk ki annak lehetőségét, hogy bizonyos kérdéseket csak az általános relativitáselméletet felváltó átfogóbb koncepció oldhat meg. Talán ilyen probléma a gravitáció és a kvantumjelenségek kapcsolata. Az elmélet mai formájában nem mond semmit a gravitációs tér kvantum-tulajdonságairól. Másrészt erről kísérleti adataink sincsenek, hiszen a környezetünkben előforduló gravitációs terekben a kvantumjelenségek — ha lennének is — mérhetetlenül kis effektusokat okoznának [59]. Így azután nem tudjuk eldönteni, hogy az elméletet a kvantumgravitációelmélet klasszikus változatának tekintsük-e vagy (a klasszikus termodinamikához hasonlóan) olyan fenomenologikus elméletnek, amelyre tilos a kvantálás szabályait alkalmazni. Valójában a más terekre jól bevált kvantálási szabályokat sem sikerült eddig a gravitációs térhez következetesen adaptálni [2, 3]. Az itt felmerülő akadályok látszólag technikai jellegűek és az egyenletek bonyolult, nemlineáris szerkezetéből származnak. A nehézségek mögött valószínűleg mély fizikai tartalom is rejtőzik azonban: érezzük, hogy a geometria törvényeit megszabó tér kvantálásakor — ha ez megengedett eljárás — szemléletmódunkon is filozófiai mélységű átalakításokat kell végrehajtanunk.

Jelen disszertációban elfogadjuk az általános relativitáselméletet a klasszikus gravitációs tér leírására. Megfontolásaink igen tekintélyes része az Einstein-egyenletek konkrét alakjától függetlenül érvényes és pusztán a gravitációs tér Riemann-



geometriai leírásmódjára épül. Természetesen az olyan eredmények levezetésében, mint például egzakt üres tér-megoldásaink, az Einstein-egyenletek érvényességét feltételezzük.

A gravitációelmélet legintenzívebben fejlődő fejezete ma a black hole (fekete lyuk) fizika [64]. Feltételezés szerint a gravitációs kollapszus végállapotaként alakulnak ki a fekete lyukak, amelyek elnevezése arra utal, hogy nem juthat ki fényjel fekete lyukból a külvilágba. Noha a természetben eddig nem sikerült meggyőzően kimutatni fekete lyukak létezését, elméletileg viszonylag jól ismerjük tulajdonságaikat. Több, a fekete lyukakra vonatkozó találgatás vár igazolásra. Ebben a vonatkozásban igen jelentős a stacionárius gravitációs terek tanulmányozása. A kollapszus végén, a gravitációs sugárzás „farkának” (gravitational wave tail) lecsengése után ugyanis stacionárius állapot alakul ki. A fekete lyuk-fizikában várható ezért az e munkában a stacionárius gravitációs terek vizsgálatára kifejlesztett módszerek egyik legfontosabb alkalmazási területe.

### Jelölések

Az irodalomban ma elterjedt jelölésmód használatára törekszünk. A koordinátákat úgy választjuk a négy dimenziós  $V_4$  világban, hogy  $x^0 = t$  legyen az időkoordináta,  $x^1$ ,  $x^2$  és  $x^3$  a helykoordináták.

### Indexek

Tenzorkomponenseket görög betűk jelölnek, melyeknek a 0, 1, 2 és 3 értékeket tulajdonítjuk.  $m, n, p$  stb. tetradindexek, értékük 0, 1, 2 vagy 3. Spinorindexeket latin nagybetűkből választunk és a 0 vagy 1 értékeket vehetik fel. A spinorindexek pontozásának tipográfiai szempontból igen kényelmetlen jelölésmódját újabban az indexek vesszőzése váltotta fel. Ezt az új jelölésmódot használjuk itt is. Vesszőzött spinorindexekre:  $A' = 0', 1'$  stb. A diádindexeket az abc elejéről vett latin kisbetűkkel jelöljük. Példák:  $a = 0, 1$ , illetőleg  $b' = 0', 1'$ . Térszerű tenzorindexeket az  $i, j, k$  stb. latin kisbetűkből választjuk;  $i, j, k, \dots = 1, 2$  és 3. Triádkomponenseket  $m, n, p$  stb. jelölnek. Triádindexek a 0, + és – értékeket veszik fel.

Valamennyi indextípusra érvényes az Einstein-féle összegezési konvenció.

### Szimmetrizálás

Az indexekben történő szimmetrizálást kerek zárójelekkel jelöljük [1]. Például

$$T_{(\mu\nu)} = \frac{1}{2!} (T_{\mu\nu} + T_{\nu\mu}).$$

Az antiszimmetrizálás jelölésére szögletes zárójelet használunk:

$$F_{[\lambda\mu\nu]} = \frac{1}{3!} (F_{\lambda\mu\nu} + F_{\nu\lambda\mu} + F_{\mu\nu\lambda} - F_{\lambda\nu\mu} - F_{\nu\mu\lambda} - F_{\mu\lambda\nu})$$

stb. A szimmetriaműveletekből kihagyott indexeket függőleges vonalakkal külö-

nítjük el. Ha például  $\xi_{ABC}$  spinort  $A$  és  $C$  indexeiben kívánjuk szimmetrizálni, ezt a következőképpen jelöljük:

$$\xi_{(A|B|C)} = \frac{1}{2}(\xi_{ABC} + \xi_{CBA})$$

### Tildézés

II. részben, III. 2. fejezetben, valamint  $B$ . Függelékben előfordulnak mind  $V_4$  téren, mind  $V_3$  téren definiált mennyiségek, ezért itt a  $V_4$  téren értelmezett mennyiségeket megkülönböztetésül tildével látjuk el. Például  $V_4$  tér metrikus tenzora  $\tilde{g}_{\mu\nu}$ ,  $V_3$  tér metrikus tenzora  $g_{ij}$ . Máshol csak  $V_4$  téren definiált mennyiségek szerepelnek; így az I. részben, az ennek anyagához kapcsolódó A. Függelékben és III. 1. fejezetben elhagyjuk a tildével történő megkülönböztetést.

### Differenciálás

A koordináták szerint történő parciális deriválást a  $\partial$  szimbólummal vagy az indexet megelőző vesszővel jelöljük:

$$\partial_\mu s = s_{;\mu} \equiv \frac{\partial s}{\partial x^\mu}.$$

A kovariáns deriválás jele a  $\nabla_\mu$  szimbólum.  $V_4$  térben a kovariáns deriválás jelölésére használjuk még az index elé írt pontosvesszőt:

$$\tilde{\nabla}_\mu V_\nu = V_{\nu;\mu}.$$

$V_3$  térben a kovariáns deriválás alternatív jelölése az index elé kerülő függőleges vonallal történik:

$$\nabla_i \varphi_j = \varphi_{j|i}.$$

### Egyéb jelölések

Definíciós egyenletekben a  $\stackrel{\text{def}}{=}$  szimbólumot használjuk. A teljesen antiszimmetrikus tenzor [55]  $V_4$  térben  $\varepsilon_{\lambda\mu\nu\varrho} \sqrt{-\tilde{g}}$ ,  $V_3$  térben  $\varepsilon_{ijk} \sqrt{g}$ , ahol  $\varepsilon_{\lambda\mu\nu\varrho}$  és  $\varepsilon_{ijk}$  teljesen antiszimmetrikus numerikus szimbólumok. A teljesen antiszimmetrikus tenzor kovariáns deriváltja zérus:

$$(\varepsilon_{\lambda\mu\nu\varrho} \sqrt{-\tilde{g}})_{;\sigma} = 0,$$

$$(\varepsilon_{ijk} \sqrt{g})_{|l} = 0.$$

A görbületi tenzor definíciójában előjeletérések tapasztalhatók az irodalomban. Itt 13. hivatkozást követve a görbületi tenzort úgy definiáljuk, hogy a Ricci-identitások

$$V_{\lambda;\mu;\nu} - V_{\lambda;\nu;\mu} = \tilde{R}^{\varrho}_{\lambda\mu\nu} V_\varrho$$

alakúak legyenek.  $\tilde{R}_{\mu\nu}$  Ricci-tenzor definíciója:

$$\tilde{R}_{\mu\nu} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{R}^{\alpha}_{\lambda\mu\nu} \lambda^\alpha_{\phantom{\alpha}\mu}.$$



A gravitációs állandót  $k$ -val jelöljük, és előjelét úgy választjuk meg, hogy az energia-impulzus-tenzor negatív előjellel szerepeljen a gravitációs egyenletekben:

$$\tilde{R}_{\mu\nu} - \frac{1}{2} \tilde{g}_{\mu\nu} \tilde{R} = -k T_{\mu\nu}.$$

Kétindexes mennyiségek mátrixos írásmódjában 4. hivatkozást követjük: függetlenül attól, hogy az indexek alsó vagy felső pozícióban vannak-e, az első a mátrix sorindexe és a második az oszlopindex.

## BEVEZETÉS

A gravitációs jelenségek elméleti vizsgálatát erősen megnehezíti az Einstein-egyenletek bonyolult nemlineáris szerkezete. Ma még nagyon kevés esetben ismerjük az adott problémára vonatkozó téregyenletek egzakt megoldását. Üres térben gömbszimmetria feltételezésével adódik például a Schwarzschild-megoldás, amely mindjárt azzal a kiábrándító eredménnyel társul, hogy nincsenek időben változó forrásmentes gömbszimmetrikus gravitációs terek (Birkhoff-tétel [58]). Általános-ságban szólva, a gravitációs egyenletek csaknem valamennyi ismert egzakt megoldása időfüggetlenséget mutat [10, 45]. Ez egyrészt megmagyarázza, hogy miért rendelkezünk ma még igen szegényes ismeretekkel a gravitációs sugárzási tér tulajdonságairól [46, 50], másrészt szerencsés abból a szempontból, hogy a mérések számára hozzáférhető gravitációs terek többsége időfüggetlen [9]. A térben izoláltan elhelyezkedő stabilis anyageloszlások gravitációs tere stacionárius. Stabilisnak tekintethető ebből a szempontból a Nap és a bolygók, valamint a csillagok és csillagtársulások igen tekintélyes hányada.

Jelen disszertáció tárgya a stacionárius gravitációs tér. A problémára vonatkozó időfüggetlen Einstein-egyenletek matematikai szerkezetével számos korábbi munka foglalkozik [1, 16, 28]. Az egyenletek struktúrája az időfüggetlenség feltételezésével sem egyszerűsödik annyira, hogy általános megoldásuk előállítására vállalkozhatnánk. Az irodalomban mindössze néhány partikuláris megoldást tartanak számon, melyek többsége vákuumot ír le [14, 15, 35]. A következőkben olyan módszerek kidolgozására törekszünk, amelyek lehetővé teszik a stacionárius terek matematikailag eddig kezelhetetlen osztályainak egzakt tárgyalását. Noha e munka kereteiben a módszereket a téregyenletek megoldásainak keresésére használjuk majd, szeretnénk rámutatni arra, hogy számos esetben *nem* szükséges a téregyenleteket megoldani valamely probléma tisztázásához. Példaként említhetjük az Israel-tételt, amelynek értelmében a forrásmentes sztatikus gravitációs terek közül csak a Schwarzschild-tér rendelkezik reguláris eseményhorizonttal [21]. A tételt sikerült bebizonyítani annak ellenére, hogy nem ismeretes a vonatkozó téregyenletek általános megoldása. Megjegyezzük, hogy az általunk kidolgozott módszerek esetleg eredménnyel használhatók a jövőben olyan problémák vizsgálatában is, mint az említett tétel általánosításából származó Israel-sejtés\*. E sejtés bizonyítása alapvető jelentőségű lenne a

\* Az egyetlen reguláris eseményhorizonttal rendelkező forrásmentes stacionárius tér a sejtés értelmében a Kerr-megoldás [23]. E disszertáció megírásakor bizonyos részeredményeket sikerült elérni az Israel-sejtés bizonyításában: *Brandon Carter* [8] megmutatta, hogy tengelyszimmetriára szorítkozva és feltételezve, hogy a tér egyszeresen összefüggő szerkezetű, a reguláris eseményhorizontot tartalmazó terek — a Kerr-megoldáshoz hasonlóan — kétparaméteres sokaságot alkotnak.

gravitációs kollapszus elméletében, és a szupernova-robbanások egy lehetséges modelljéhez vezetne [22].

A magyar nyelvű szakirodalom mindmáig nélkülözi a gravitációelméletben kidolgozott spinormódszereket ismertető vagy azokat alkalmazó munkákat. Az egyetlen ide vonatkozó utalás *Novobátzky* könyvének [31] Függelékében található. Ezt olvasva azonban könnyen arra a helytelen következtetésre juthatunk, hogy a spinorok fogalma a görbült tértől teljesen idegen, ezért az általános relativitás-elméletbe nem vihető át. A következőkben gyakran hivatkozunk majd olyan eredményekre, amelyek a gravitációelmélet spinormódszereivel jöttek létre. Ezek kidolgozása jórészt *Newman* és *Penrose* érdeme. Az említett körülmények indokoltá teszik összefoglaló ismertetésüket. Erre vállalkoztunk e munka első részében. A második és harmadik részben — hacsak más hivatkozást nem jelölünk meg — a szerző saját eredményei kerülnek ismertetésre.

A második részben a stacionárius terekre vonatkozó alapismeretek összefoglalása után a háromdimenziós relativitáselméletet tárgyaljuk. Az ebben foglalt alapelveket felhasználjuk egyrészt a stacionárius terek invariáns osztályozására, másrészt a téregyenletek  $SU(2)$  spinoralakjának levezetésére. Megmutatjuk, hogy a stacionárius terek egyértelműen meghatároznak egy háromdimenziós térben elhelyezkedő görbesereget. E görbék a tér sajátságainak nevezzük. Levezetjük a Kerr-megoldást azzal a feltételezéssel, hogy a sajátságok nyírásmentesek és geodetikusak. Megjegyzendő, hogy korábban nem sikerült olyan feltételt találni, amelynek felhasználásával a Kerr-megoldás levezethető a stacionárius téregyenletekből, és így véletlennek tűnt eddig, hogy a Kerr-tér megoldása az egyenleteknek [27]. A 8. fejezetben a geodetikus sajátságokkal rendelkező terek tulajdonságaival foglalkozunk. A 9. fejezetben megadjuk a téregyenletek általános megoldását arra az esetre, ha a sajátságok geodetikusak és nyírásuk nem tűnik el.

A harmadik részben a röviden elektrovákuumnak nevezett, kölcsönható gravitációs és elektromágneses terekből álló rendszereket vizsgáljuk. Megmutatjuk, hogy sztatikus elektrovákuumban az Einstein-egyenletekből igen erős megszorítás adódik az elektromágneses térmennyiségekre. Felírjuk az elektrovákuum egyenleteit szimmetrikus alakban. Módszert adunk meg elektrovákuum-megoldások általánosítására.

A 3. lapon összefoglaltuk az általunk használt jelöléseket. Erre a szövegben a <sup>J</sup> hivatkozással utalunk.



## I. RÉSZ

### SPINOROK AZ ÁLTALÁNOS RELATIVITÁSELMÉLETBEN

A gravitációs térre általánosított spinorkalkulust *Infeld* és *van der Waerden* alkották meg [20] 1933-ban. A formalizmus jelentőségét csak néhány éve ismerték fel. Valószínűleg *Roger Penrose* alapvető fontosságú dolgozatának [40] megjelenésétől (1960) számíthatjuk a spinormódszerek alkalmazásának kezdetét az általános relativitáselméletben. *Penrose* írta fel először a gravitációs egyenletek spinoralakját. Később *Ezra T. Newmann*al megalkották a spin koefficiensek módszerét [33], amely ma a téridő szerkezetének kutatásában a legintenzívebben alkalmazott matematikai eljárások egyike.

#### 1. Spinoralgebra

$\xi^A$  egyindexes spinor olyan komplex, kétkomponensű mennyiség, amelyre a spintranszformációk a

$$\hat{\xi}^A = \Lambda^A_B \xi^B \quad (1.1)$$

minta szerint hatnak [4]. Itt  $\hat{\xi}^A$  a transzformált spinor és  $\Lambda^A_B$  a spintranszformáció mátrixeleme.  $[\Lambda^A_B]$  unimoduláris mátrixok<sup>1</sup> az  $SL(2, C)$  csoport definiáló ábrázolását alkotják,

$$\det[\Lambda^A_B] = 1. \quad (1.2)$$

$\xi^A$  kontravariáns spinor. Egyindexes kovariáns spinorok  $[\Lambda^A_B]$  mátrix inverzével transzformálódnak:

$$\hat{\xi}_A = \xi_B (\Lambda^{-1})^B_A. \quad (1.3)$$

Tetszőleges  $\xi_B$  és  $\eta^B$  spinorok kontrakciója invariáns skalár. A spintranszformációk unimoduláris jellegéből következik, hogy  $\xi^A$  és  $\eta^A$  kontravariáns spinorokból az

$$\varepsilon_{AB} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

antiszimmetrikus spinor segítségével alkothatunk invariánst:  $\xi^A \eta^B \varepsilon_{AB}$ . E kétfajta invariánst azonosnak tekintve, a spinorindexek lehúzásának szabályához jutunk:

$$\xi_B = \xi^A \varepsilon_{AB}. \quad (1.5)$$

$\varepsilon_{AB}$  spinor (1.4) alakját a spintranszformációk megőrzik.  $\varepsilon_{AB}$  elnevezése: fundamentális vagy metrikus spinor. A spinorindexek felhúzása a fundamentális spinor  $\xi^{AB}$  inverzével történik:

$$\xi^A = \varepsilon^{AB} \xi_B, \quad (1.6)$$

ahol értelemszerűen

$$\varepsilon^{AB} \varepsilon_{CB} = \delta^A_C. \quad (1.7)$$

$\xi^A$  spinor komplex konjugáltja (1.1)-től eltérő módon transzformálódik:

$$\bar{\xi}^{A'} = \bar{A}^{A'}_{B'} \bar{\xi}^{B'}. \quad (1.8)$$

(1.8)-ban vesszővel láttuk el a spinorindexeket, és a továbbiakban valamennyi, (1.8) minta szerint transzformálandó spinorindexet vesszővel különböztetünk meg az (1.1) transzformációs szabálynak eleget tevő indexektől (az indexek korábban használatos pontozását újabban vesszőzés váltotta fel az irodalomban<sup>1)</sup>). Komplex konjugáláskor tehát a vesszőtlen indexek vesszőssé válnak. (1.8) komplex konjugáltjából pedig az látszik, hogy vesszős indexek komplex konjugáláskor vesszőtlenné lesznek.

A vesszős indexeket az

$$\varepsilon_{A'B'} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.9)$$

fundamentális vesszős spinor (ill.  $\varepsilon^{A'B'}$  inverze) segítségével húzzuk fel (le). Vesszős indexet természetesen nem kontrahálhatunk vesszőtlennel, hiszen ily módon nem jutunk invariáns kifejezéshez.

A fundamentális spinor antiszimmetriájára vezethető vissza, hogy tetszőleges, a vesszős és vesszőtlen indexeiben külön-külön teljesen szimmetrikus  $\psi_{ABC...PR'S'...Z'} = \psi_{(ABC...P)(R'S'...Z')}$  spinor<sup>1)</sup> irreducibilis. Ugyanezen okból bármely egyindexes  $\xi_A$  spinor „hossza” zérus:

$$\xi_A \xi^A = \xi_A \varepsilon^{AB} \xi_B = -\xi^B \xi_B = 0. \quad (1.10)$$

Spinorok és tenzorok között a  $\sigma_{\mu AB'}$  „összekötő mennyiségek” teremtenek kapcsolatot.  $\mu$  index rögzített értékére definíció szerint  $[\sigma_{\mu AB'}]$  hermitikus mátrix:

$$\bar{\sigma}_{\mu AB'} = \sigma_{\mu B A'}. \quad (1.11)$$

Megköveteljük továbbá  $\sigma_{\mu AB'}$ -re a

$$\sigma_{\mu AC'} \sigma_{\nu B}^{C'} + \sigma_{\nu AC'} \sigma_{\mu B}^{C'} = g_{\mu\nu} \varepsilon_{AB} \quad (1.12)$$

feltétel teljesülését. A) Függelékben konstruktív bizonyítást adunk az (1.11) és (1.12) feltételeknek eleget tevő  $\sigma_{\mu AB'}$  mennyiségek létezésére.

Bármely tenzorhoz megfelelő spinort rendelhetünk az összekötő mennyiségek felhasználásával. Tekintsük például az  $X^{\lambda\mu}_\nu$  tenzort. Spinormegfelelőjét a következőképpen kapjuk:

$$X^{AB'CD'}_{EF'} = \sigma_{\lambda}^{AB'} \sigma_{\mu}^{CD'} X^{\lambda\mu}_\nu \sigma_{EF'}^\nu. \quad (1.13)$$

(1.12) tulajdonságot felhasználva felírhatjuk a megfordított relációt; példánkban  $X^{\lambda\mu}_\nu$  tenzort  $X^{AB'CD'}_{EF'}$  spinorral fejezzük ki:

$$X^{\lambda\mu}_\nu = \sigma_{AB'}^\lambda \sigma_{CD'}^\mu X^{AB'CD'}_{EF'} \sigma_{\nu}^{EF'}. \quad (1.14)$$

(1.1) tulajdonság alapján nyilvánvaló, hogy valós  $X^{\lambda\mu}_\nu$  tenzor spinor megfelelője hermitikus az alábbi értelemben:

$$X^{AB'CD'}_{EF'} = \bar{X}^{B'ADC'}_{F'E}. \quad (1.15)$$



A továbbiakban gyakran hivatkozunk majd a  $\sigma_{\mu AB'}$  összekötő mennyiségek egyik alapvető tulajdonságára:

$$\sigma_{\mu AC'} \sigma_{BD'}^\mu = \varepsilon_{AB} \varepsilon_{C'D'}. \quad (1.16)$$

(1.16) belátására kontraháljuk (1.12) egyenlet mindkét oldalát  $\varepsilon^{AB}$ -vel:

$$\sigma_{\mu AC'} \sigma_{\nu}^{AC'} = g_{\mu\nu}. \quad (1.17)$$

$\sigma_{BD'}^\mu$ -vel szorzunk:

$$\sigma_{BD'}^\mu \sigma_{\mu AC'} \sigma_{\nu}^{AC'} = \sigma_{\nu BD'}. \quad (1.18)$$

Innen (1.16) tulajdonság közvetlenül leolvasható.

A spinoralgebra jónéhány sajátos vonása levezethető a következő azonosságból<sup>1</sup>:

$$\varepsilon_{A[B} \varepsilon_{CD]} = 0. \quad (1.19)$$

A baloldal csakis akkor nem tűnnék el, ha a három antiszimmetrizált index mindegyike különböző értéket venne fel. Spinorindexek azonban csak a 0 és 1 értékek közül választhatók. (1.19) érvényessége ezért nyilvánvaló.

(1.19) azonosság első alkalmazásaként belátjuk a következő összefüggést: Legyen  $\eta_{AB}$  tetszőleges kétindexes spinor. Állítás:

$$\eta_{AB} - \eta_{BA} = \varepsilon_{AB} \eta^R_R. \quad (1.20)$$

Írjuk fel részletes alakban (1.19) azonosságot:

$$\varepsilon_{AB} \varepsilon_{CD} + \varepsilon_{AD} \varepsilon_{BC} + \varepsilon_{AC} \varepsilon_{DB} = 0. \quad (1.21)$$

$\eta^{CD}$ -vel végzett kontrakció közvetlenül szolgáltatja (1.20) összefüggést.

(1.19) fontos következménye, hogy valós, antiszimmetrikus  $F_{\mu\nu}$  tenzornak kétindexes, szimmetrikus  $\Phi_{AB}$  spinor felel meg. Az antiszimmetriából:

$$F_{AB'CD'} = -F_{CD'AB'}, \quad (1.22)$$

ahol

$$F_{AB'CD'} = F_{\mu\nu} \sigma_{AB'}^\mu \sigma_{CD'}^\nu. \quad (1.23)$$

(1.22) alapján írhatjuk:

$$\begin{aligned} F_{AB'CD'} &= \frac{1}{2} (F_{AB'CD'} - F_{CD'AB'}) = \\ &= \frac{1}{2} (F_{AB'CD'} - F_{CB'AD'}) + \frac{1}{2} (F_{CB'AD'} - F_{CD'AB'}). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Felhasználjuk (1.20) összefüggést:

$$F_{AB'CD'} = \frac{1}{2} (\Phi_{AC} \varepsilon_{B'D'} + \bar{\Phi}_{B'D'} \varepsilon_{AC}). \quad (1.25)$$

Itt bevezettük a

$$\Phi_{AC} \stackrel{\text{def}}{=} F_{AB'C}{}^{B'} \quad (1.26)$$

jelölést.  $\Phi_{AC}$  spinor szimmetrikus; ez (1.22) tulajdonságból következik.  $F_{\mu\nu}$  spinor-megfelelője tehát a  $\Phi_{AC}$  kétindexes, szimmetrikus spinor.

## 2. Spinoranalízis

Ha általános koordinátákat használunk, a spinorterek parciális deriváltja (mint a tenzorterek esetében) nem mutat egyszerű kovarianciátulajdonságokat. Ezért a tenzoranalízis kovariáns deriválóoperátora mintájára bevezetjük a kovariáns spinorderivált fogalmát [4]. A spinorok kovariáns deriválásának jelölésére is a  $\nabla_\mu$  szimbólumot használjuk<sup>1</sup>. A következő alaptulajdonságokat posztuláljuk:

1. *Linearitás*: azonos típusú spinorok összegének kovariáns deriváltja megegyezik a tagok kovariáns deriváltjának összegével.

2. *Leibnitz-szabály*: spinorok szorzatát úgy deriváljuk, hogy a tényezőkre sorra hatunk a deriválóoperátorral és az így nyert tagokat összegezzük.

3. *Skalár függvény deriválása*: skalárok (vagyis zérusrendű spinorok) kovariáns spinorderiváltja egyezzen meg a parciális deriválttal.

4. *A spinorderiválás valós művelet*: kovariáns spinorderivált komplex konjugáltja megegyezik a komplex konjugált spinor kovariáns deriváltjával.

5.  $\varepsilon_{AB}$  és  $\sigma_{AC'}^\mu$  kovariáns deriváltja eltűnik:

$$\nabla_\mu \varepsilon_{AB} = 0, \quad (2.1a)$$

$$\nabla_\mu \sigma_{AC'}^\nu = 0. \quad (2.1b)$$

A fenti követelményekkel összhangban egyindexes  $\xi_A$  spinor kovariáns deriváltjának részletes alakja [4]:

$$\nabla_\mu \xi_A = \partial_\mu \xi_A - \Gamma_{\mu A}^B \xi_B. \quad (2.2)$$

$\Gamma_{\mu A}^B$  mennyiség a spinor affin kapcsolat. Explicit alakját (2.1b)-ből kapjuk:

$$0 = \nabla_\mu \sigma_{AC'}^\nu = \partial_\mu \sigma_{AC'}^\nu - \Gamma_{\mu A}^R \sigma_{AC'}^\nu - \bar{\Gamma}_{\mu C'}^{S'} \sigma_{AS'}^\nu + \Gamma_{\mu \rho}^\nu \sigma_{AC'}^\rho. \quad (2.3)$$

$\sigma_{AC'}^\nu$ -vel kontrahálunk és felhasználjuk (1.16)-ot:

$$\Gamma_{\mu A}^B = \frac{1}{2} \sigma_{AC'}^{BC'} (\sigma_{AC'}^\lambda \Gamma_{\lambda \mu}^\nu + \partial_\mu \sigma_{AC'}^\nu). \quad (2.4)$$

(2.1a)-ból kapjuk:

$$\Gamma_{\mu A}^A = 0. \quad (2.5)$$

Többindexes spinorok kovariáns deriválási szabályai 2. tulajdonságból, a kovariáns deriválás hatása vesszőzött indexekre 4. tulajdonságból következik. 5. tulajdonság biztosítja, hogy  $\nabla_\mu$  operátor felcserélhető az  $\varepsilon_{AB}$  fundamentális spinorral és az összekötő mennyiségekkel végzett műveletekkel.

A spinoranalízist néha úgy építik fel, hogy (2.1a) tulajdonság fennállását nem követelik meg. Ekkor (2.5) nem teljesül általában, ezért  $\Gamma_{\mu AB}$  a spinorindexekben nem szimmetrikus.  $\Gamma_{\mu AB}$  antiszimmetrikus része transzformációs tulajdonságai alapján az elektromágneses vektorpotenciállal azonosítható. Ily módon a spinor kalkulus alkalmassá válik arra, hogy az einsteini relativitáselmélet geometriájának általánosítása nélkül az elektromágneses jelenségeket formálisan belefoglalhassuk a geometriába. A spinoranalízisnek ez a változata azonban nem teszi lehetővé, hogy az



$\varepsilon_{AB}$  fundamentális spinorral a kovariáns deriválás jele alatt hassunk, ezáltal a formalizmus célszerűtlenül nehézkesé válik. *Roger Penrose* [40] nyomán ezért (2.1a) tulajdonság fennállását ma általában már posztulálják, az elektromágnességet pedig önálló fizikai térként tárgyalják. Ezt az álláspontot fogadjuk el jelen értekezésben is.

A tenzorok és spinorok között létesített kapcsolat kiterjeszthető a kovariáns deriválóoperátorra is.

Kovariáns mennyiségek *spinorderiváltját* a

$$\nabla_{AB'} = \sigma_{AB'}^\mu \nabla_\mu \quad (2.6)$$

összefüggéssel megadott operátorral képezzük. Például  $S$  skalár függvény spinorderiváltja:

$$\nabla_{AB'} S = \sigma_{AB'}^\mu \partial_\mu S. \quad (2.7)$$

### 3. Görbületi spinor és Petrov-osztályozás

A négydimenziós világ görbültségét jellemző  $R_{\alpha\beta\gamma\delta}$  Riemann-tenzor (más néven görbületi tenzor) kifejezhető a  $\Gamma_{\lambda\mu}^\nu$  Christoffel-szimbólumok és parciális deriváltjaik segítségével [13]<sup>j</sup>:

$$R_{\beta\gamma\delta}^\alpha = \Gamma_{\beta\delta, \gamma}^\alpha - \Gamma_{\beta\gamma, \delta}^\alpha + \Gamma_{\beta\delta}^\alpha \Gamma_{\alpha\gamma}^\alpha - \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \Gamma_{\alpha\delta}^\alpha. \quad (3.1)$$

$R_{\alpha\beta\gamma\delta}$  tenzor antiszimmetrikus  $\alpha$  és  $\beta$  indexek, továbbá  $\gamma$  és  $\delta$  indexek felcserélésével szemben:

$$R_{\alpha\beta\gamma\delta} = -R_{\beta\alpha\gamma\delta} = -R_{\alpha\beta\delta\gamma}. \quad (3.2)$$

Az említett indexpárookban szimmetrikus a görbületi tenzor:

$$R_{\alpha\beta\gamma\delta} = R_{\gamma\delta\alpha\beta}, \quad (3.3)$$

továbbá teljesíti az

$$R_{\alpha[\beta\gamma\delta]} = 0 \quad (3.4)$$

összefüggéseket. (3.2), (3.3) és (3.4) fennállása a görbületi tenzor (3.1) felépítéséből következik. A továbbiakban nem hivatkozunk  $R_{\alpha\beta\gamma\delta}$  konkrét szerkezetére, csupán szimmetriatulajdonságait használjuk fel spinorekvivalensének megkonstruálása során.

$R_{\beta\gamma\delta}^\alpha$  reducibilis tenzormennyiség; spurja az

$$R_{\beta\gamma} = R_{\beta\gamma\alpha}^\alpha \quad (3.5)$$

Ricci-tenzor\*. A görbületi tenzor szimmetriatulajdonságai következtében bármely (nem antiszimmetrikus) indexpár kontrakciója előjeltől eltekintve a Ricci-tenzort adja.

\* Néhány szerző a Ricci-tenzort (3.5)-höz viszonyítva ellentétes előjellel definiálja. E munka az elterjedtebb konvenciót [13] követi.

*Novobátzky* [31]  $R_{\lambda\mu}$  tenzort Einstein-tenzornak nevezi. Az irodalomban (31. hivatkozástól eltekintve) ezt az elnevezést az Einstein-egyenletek bal oldalán szereplő  $R_{\lambda\mu} - \frac{1}{2} g_{\lambda\mu} R$  tenzorra tartják fenn, ezért e tekintetben eltérünk 31. hivatkozás nómenklatúrájától.

A Ricci-tenzor redukciója az

$$R \stackrel{\text{def}}{=} R^a_e \quad (3.6)$$

görbületi skalárt szolgáltatja.  $R_{\alpha\beta\gamma\delta}$  spurjainak levonásával az irreducibilis

$$\begin{aligned} C_{\alpha\beta\gamma\delta} = & R_{\alpha\beta\gamma\delta} + \frac{1}{2} (g_{\alpha\gamma} R_{\beta\delta} - g_{\alpha\delta} R_{\beta\gamma} + g_{\beta\delta} R_{\alpha\gamma} - g_{\beta\gamma} R_{\alpha\delta}) + \\ & + \frac{1}{6} R (g_{\alpha\delta} g_{\beta\gamma} - g_{\alpha\gamma} g_{\beta\delta}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Weyl-tenzort kapjuk.

Tetszőleges  $s$  skalár függvénnyel végrehajtott,

$$g'_{\mu\nu} = s g_{\mu\nu} \quad (3.8)$$

alakú konform transzformációkkal szemben  $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$  invariáns [13], ezért olykor konform tenzornak is nevezik.

A görbületi tenzor redukciója azt mutatja, hogy az

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} R = -k T_{\mu\nu} \quad (3.9)$$

Einstein-egyenletek e tenzor spurjaira jelentenek algebrai feltételeket, ha az anyagelosztást  $T_{\mu\nu}$  energiaimpulzustenzor megadásával rögzítjük. A gravitációs tér belső szabadsági fokait ezért a görbületi tenzor spurmentes része: a Weyl-tenzor hordozza.

Vákuumban ( $T_{\mu\nu} = 0$ ) a (3.9) Einstein-egyenletek tartalma az, hogy a görbületi tenzor spurjai eltűnnek, ezért üres térben  $R_{\alpha\beta\gamma\delta} = C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ . A gravitációs térrel kapcsolatos problémák igen jelentős hányada vákuumra vonatkozik, és ez a tény szabja meg a Weyl-tenzor algebrai tulajdonságaira épülő Petrov-osztályozás [45] fontosságát. A gravitációs terek Petrov-féle osztályozása eredeti formájában hagyományos tenzormódszerek felhasználásával történik. Amint *Roger Penrose* megmutatta [40], előnyösebb a Petrov-osztályozást spinormódszerekkel bevezetni. Most Penrose munkáját követjük a Petrov-osztályozás ismertetésében. E célból felírjuk a görbületi tenzor felbontását irreducibilis spinorokra.

A görbületi tenzorhoz rendelt spinormennyiségek a spinoralgebra módszereivel alkothatók meg. (3.2–4) tulajdonságokat felhasználva, az antiszimmetrikus tenzorokra érvényes (1.25) összefüggés levezetésének mintájára nyerjük:

$$\begin{aligned} -R_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{AE'}^\alpha \sigma_{BF'}^\beta \sigma_{CG'}^\gamma \sigma_{DH'}^\delta = & \Psi_{ABCD} \varepsilon_{E'F'} \varepsilon_{G'H'} + \varepsilon_{AB} \varepsilon_{CD} \bar{\Psi}_{E'F'G'H'} + \varepsilon_{AB} \Phi_{CDE'F'} \varepsilon_{G'H'} + \\ & + \varepsilon_{CD} \Phi_{ABG'H'} \varepsilon_{E'F'} + 2\Lambda (\varepsilon_{AC} \varepsilon_{BD} \varepsilon_{E'F'} \varepsilon_{G'H'} + \varepsilon_{AB} \varepsilon_{CD} \varepsilon_{E'H'} \varepsilon_{F'G'}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Itt  $\Psi_{ABCD}$  teljesen szimmetrikus négyindexes spinor,

$$\Psi_{ABCD} \stackrel{\text{def}}{=} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{AE'}^\alpha \sigma_{BF'}^\beta \sigma_{CG'}^\gamma \sigma_{DH'}^\delta. \quad (3.11)$$

$\Psi_{ABCD}$  tehát a Weyl-tenzorral ekvivalens.  $\Phi_{ABC'D'}$  spinor a Ricci-tenzor spurmentes részével függ össze:

$$2\Phi_{ABC'D'} \stackrel{\text{def}}{=} \left( R_{\mu\nu} - \frac{1}{4} g_{\mu\nu} R \right) \sigma_{AC'}^\mu \sigma_{BD'}^\nu. \quad (3.12)$$



$\Phi_{ABC'D'}$  egynemű indexeiben szimmetrikus és (annak következtében, hogy a Ricci-tenzor valós) hermitikus spinor:

$$\Phi_{ABC'D'} = \Phi_{(AB)(C'D')} = \bar{\Phi}_{C'D'AB}. \quad (3.13)$$

Végül, (3.10)-ben  $\Lambda$  skalárt így definiáltuk:

$$\Lambda \stackrel{\text{def}}{=} R/24. \quad (3.14)$$

(3.10) dekompozíció (3.7) spinoranalagonjának tekinthető.  $\Phi_{ABC'D'}$  és  $\Lambda$  mennyiségeket (3.9) gravitációs egyenletek lokálisan meghatározzák adott *anyageloszlás* (vagyis rögzített  $T_{\mu\nu}$ ) esetében.  $\Psi_{ABCD}$  jellemzi tehát a *gravitációs tér* strukturáját. Vákuumban  $\Phi_{ABC'D'} = \Lambda = 0$ , ezért itt  $\Psi_{ABCD}$  a görbületi spinor.  $\Psi_{ABCD}$  spinor algebrai tulajdonságaira épül a gravitációs terek alább ismertetendő Petrov-féle osztályozása.

Tetszőleges szimmetrikus spinor felbontható egyindexes spinorok szimmetrizált szorzatára. A spinoralgebrának ezt a fontos eredményét *Roger Penrose* [40] vezette le. Az állítás bizonyítása a következőképpen történik:

Legyen  $\varphi_{ABC\dots}$  tetszőleges szimmetrikus (vagy irreducibilis, l. az 1. fejezetet) spinor  $p$  darab indexszel. Vizsgáljuk az alábbi kifejezést:

$$\varphi(\xi) = \varphi_{ABC\dots} \xi^A \xi^B \xi^C \dots \quad (3.15)$$

Itt  $\xi^A$  tetszőleges egyindexes spinor,  $\xi^A \neq 0$ . Legyen például  $\xi^0 \neq 0$ . Ekkor a  $z = \xi^1/\xi^0$  jelöléssel,  $(\xi^0)^p$  faktort kiemelve [3.15] jobb oldalán, ezt írhatjuk:

$$\varphi(\xi) = (\xi^0)^p p(z), \quad (3.16)$$

ahol  $P(z)$   $z$ -ben polinomiális komplex kifejezés.  $P$  faktorizálható:

$$P(z) = (\alpha_1 z - \alpha_0)(\beta_1 z - \beta_0)(\gamma_1 z - \gamma_0) \dots \quad (3.17)$$

(3.17) jobb oldalán  $p$  darab tényező áll. Ezek mindegyikét komplex faktortól eltekintve  $P(z)$  meghatározza.

$P(z)$  faktorizált alakját visszaírjuk (3.16)-ba:

$$\varphi(\xi) = (\alpha_A \xi^A)(\beta_B \xi^B)(\gamma_C \xi^C) \dots \quad (3.18)$$

(3.15) és (3.18) egyenletekből:

$$(\varphi_{ABC\dots} - \alpha_A \beta_B \gamma_C \dots) \xi^A \xi^B \xi^C \dots = 0. \quad (3.19)$$

$\xi^A$  spinor tetszőleges, ezért írhatjuk:

$$\varphi_{ABC\dots} = \alpha_A \beta_B \gamma_C \dots \quad (3.20)$$

A baloldalon spinormennyiség áll. A spinorindexek transzformációs szabályából következik, hogy  $\alpha_A, \beta_B, \gamma_C$  stb. mennyiségek egyindexes spinorok. Elnevezésük:  $\varphi_{ABC\dots}$  *principális spinorai*. Mindegyikük komplex skalár faktor erejéig határozható meg.

Tetszőleges egyindexes  $\xi_A$  spinor meghatároz a téridőben egy  $l_\mu$  fényszerű vektort:

$$l_\mu = \xi_A \sigma_\mu^{AB'} \bar{\xi}_{B'}. \quad (3.21)$$

$\sigma_v^{AB'}$  összekötő mennyiségek (1.16) tulajdonsága alapján egyszerűen belátható, hogy  $l_\mu$  valóban fényszerű:

$$l^\mu l_\mu = (\xi_A \sigma^{\mu AB'} \bar{\xi}_{B'}) (\xi_C \sigma_\mu^{CD'} \bar{\xi}_{D'}) = \xi_A \bar{\xi}_{B'} \xi_C \bar{\xi}_{D'} \varepsilon^{AC} \varepsilon^{B'D'} = 0. \quad (3.22)$$

A principális spinorok által kijelölt fényszerű vektorok skalár szorzó erejéig adóttak. Ez a tény úgy értelmezhető, hogy a principális spinor fényszerű *irányt* jelöl ki a téridőben. Ennek szokásos elnevezése: *null főirány*.  $\varphi_{ABC\dots}$  spinor (3.20) alakú *kanonikus felbontása* tehát legalább egy, de legfeljebb  $p$  darab null főirányt határoz meg a négyes világban. Ily módon a szimmetrikus,  $p$  indexes spinorok osztályozása a null főirányok multiplicitásának leszámolásával történhetik. Egy-egy típus megfelel a  $p$  egész szám valamely lehetséges módon egészek összegére történő felbontásának.

Tekintsük például a  $\varphi_{AB}$  szimmetrikus, kétindexes spinort. Ebben az esetben mindössze két osztály létezik annak megfelelően, hogy a két null főirány egybeesik-e vagy nem:

Kanonikus felbontás	Típus jele
$\Phi_{AB} = \alpha_{(A} \beta_{B)}$	[1],
$\Phi_{AB} = \alpha_{(A} \alpha_{B)}$	[2].

(3.23)

A típusokat a  $p=2$  számnak a null főirányok multiplicitása szerint történő felbontásával jelöljük.

Általában, legyen  $\varphi_{ABC\dots}$  szimmetrikus,  $p$  indexes spinor  $n$  darab  $\alpha_A, \beta_B, \gamma_C, \dots, \lambda_N$  principális spinorral ( $n \leq p$ ). Ha  $\alpha_A$   $q$ -szoros principális spinor, akkor éppen  $q$ -szor fordul elő  $\varphi_{ABC\dots}$  (3.20) alakú kanonikus előállításában. Legyen a principális spinorok multiplicitása rendre  $q_1, q_2, \dots, q_L$ , akkor

$$q_1 + q_2 + \dots + q_L = p. \quad (3.24)$$

A szimmetrikus  $p$  indexes spinorok  $p$  egész szám összes lehetséges  $[q_1 q_2 \dots q_L]$  particióinak megfelelő típusokba sorolhatók.

Legyen  $\alpha_A$  principális spinor multiplicitása  $q_1$ . A kanonikus alak ekkor így írható fel:

$$\varphi_{AB\dots P} = \alpha_{(A} \alpha_B \dots \alpha_E \beta_F \dots \lambda_P). \quad (3.25)$$

A jobboldalon  $\alpha_A$  spinor  $q_1$ -szer fordul elő. A  $\beta_F, \dots, \lambda_P$  principális spinorok egyike sem arányos  $\alpha_A$ -val. Kontraháljuk (3.25)-öt a  $p - q_1$  tényezőt tartalmazó  $\alpha^F \dots \alpha^P$  szorzattal. Csak azok a tagok nem tűnnek el a jobboldalon, amelyekben  $\alpha$  nincs kontrahálva  $\alpha$ -val, így

$$\varphi_{AB\dots P} \alpha^F \dots \alpha^P = \lambda \alpha_A \dots \alpha_E, \quad \lambda \neq 0. \quad (3.26)$$

Ha (3.26)-ot kontraháljuk  $\alpha^A$ -val, akkor a jobboldal eltűnik.

Most alkalmazzuk a klasszifikációs módszert a négyindexes  $\Psi_{ABCD}$  Weyl-spinorra. A lehetséges típusok kanonikus felbontását, szimbolikus ábrázolását, elnevezését, továbbá az adott típusú Weyl-spinor által kielégített (3.26) mintájú algebrai egyenletet 3.1 táblázatban foglaltuk össze.



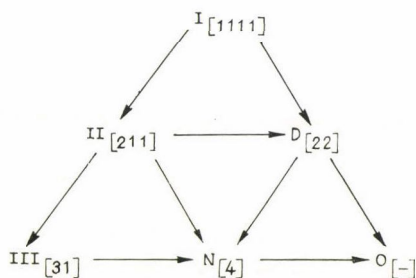
## 3.1 TÁBLÁZAT

A Weyl-spinor lehetséges algebrai típusai

$\Psi_{ABCD}$ kanonikus felbontása	Szimbolikusan	Petrov típus	$\Psi_{ABCD}$ kielégíti ( $\lambda \neq 0$ ):
$\alpha_{(A} \beta_B \gamma_C \delta_{D)}$	[1111]	I	$\Psi_{ABCD} \alpha^B \alpha^C \alpha^D = \lambda \alpha_A$ $\Psi_{ABCD} \alpha^C \alpha^D = \lambda \alpha_A \alpha_B$ $\Psi_{ABCD} \alpha^D = \lambda \alpha_A \alpha_B \alpha_C$ $\Psi_{ABCD} = \alpha_A \alpha_B \alpha_C \alpha_D$ $\Psi_{ABCD} = 0$
$\alpha_{(A} \alpha_B \beta_C \gamma_{D)}$	[211]	II	
$\alpha_{(A} \alpha_B \beta_C \beta_{D)}$	[22]	D	
$\alpha_{(A} \alpha_B \alpha_C \beta_{D)}$	[31]	III	
$\alpha_{(A} \alpha_B \alpha_C \alpha_{D)}$	[4]	N	
0	—	0	

Teljesség kedvéért a táblázatban feltüntettük azt az esetet is, ha a Weyl-tenzor eltűnik (konformisan sima tér). Vákuumban a Weyl-tenzor megegyezik a görbületi tenzorral, ezért az egyetlen Petrov 0 típusú üres téridő a Minkowski-féle görbüetlen világ.

Az egyes Petrov-típusok speciális esetként tartalmazzák a 3.1 táblázatban alattuk következő típusokat\*. A típusoknak a null főirányok multiplicitásán alapuló hierarchiáját 3.2 ábrán vázoltuk fel. Az ábrán a nyilak a lehetséges specializálódás



3.2. Penrose-ábra

irányát mutatják. Például a Petrov-féle D típus az I. típusnak az a speciális esete, ha két-két principális irány egybeesik, a II. típusból pedig az egyszeres multiplicitású főirányok egybeesítésével kapjuk.

Az I. típust algebrailag általános típusnak, az összes többi Petrov-típusokat pedig algebrailag speciális típusnak is nevezik. Az elnevezés arra utal, hogy az I. típusú  $\Psi_{ABCD}$  spinor a lehetséges legáltalánosabb alakú kanonikus felbontással rendelkezik.

Megjegyezzük, hogy azokat az

$$x^\mu = x^\mu(u) \quad (3.26)$$

fényszerű görbék, amelyeknek

$$l^\mu = \frac{dx^\mu}{du} \quad (3.27)$$

\* Maguk a típusnevek történelmi eredetűek. Magyarázatuk megtalálható például 46. hivatkozásban.

érintő vektora ( $I_\mu l^\mu = 0$  és  $u$  tetszőleges vonalmenti paraméter) mindenütt párhuzamos a null főirányok valamelyikével, Roy Sachs [50] nyomán a gravitációs tér *sugarainak* nevezzük.

#### 4. Az általános relativitáselmélet alapvető összefüggéseinek spinoralakja

A görbületi tenzor megjelenik a Riemann-geometria két alapvető azonosságában. Ezek a Ricci- és Bianchi-identitások. A Ricci-identitás a vektorra ható kovariáns deriválóoperátorok kommutációs törvénye:

$$\nabla_\mu \nabla_\nu v_\varrho - \nabla_\nu \nabla_\mu v_\varrho = -R^\sigma_{\varrho\mu\nu} v_\sigma \quad (4.1)$$

(4.1) ismételt kovariáns deriválásával és az  $R_{\lambda\mu\nu\varrho}$  tenzor (3.2—4) szimmetriatulajdonságai segítségével nyerjük a görbületi tenzorra vonatkozó Bianchi-identitást:

$$R_{\lambda\mu[\nu\varrho;\sigma]} = 0. \quad (4.2)$$

(4.1) és (4.2) azonosságokat spinoralakban kívánjuk felírni. Ebből a célból a kovariáns deriváló operátorok kommutátorát most az  $X_{\varrho\sigma}$  komplex antiszimmetrikus tenzorra hattatjuk. A kovariáns deriválás szabályai és (4.1) alapján írhatjuk:

$$(\nabla_\mu \nabla_\nu - \nabla_\nu \nabla_\mu) X_{\varrho\sigma} = R_{\mu\nu\varrho\alpha} X^\alpha_\sigma + R_{\mu\nu\sigma\alpha} X^\alpha_\varrho \quad (4.3)$$

$(\nabla_\mu \nabla_\nu - \nabla_\nu \nabla_\mu)$  antiszimmetrikus a  $(\mu, \nu)$  indexpárban, ezért alkalmazható rá az (1.25) típusú dekompozíció:

$$\nabla_{AW'} \nabla_{BX'} - \nabla_{BX'} \nabla_{AW'} = \varepsilon_{AB} \nabla_H (W' \nabla^{H'}_{X'}) - \varepsilon_{W'X'} \nabla^{P'}_{(A} \nabla_{B)P'}. \quad (4.4)$$

Ennek segítségével (4.3) azonosságból két spinorösszefüggést kapunk. (4.3) indexeit kontrahálva a  $\sigma^\mu_{AB'}$  összekötő mennyiségekkel:

$$(\nabla_{AW'} \nabla_{BX'} - \nabla_{BX'} \nabla_{AW'}) X_{CY' DZ'} = R^{EQ'}_{CY' AW' BX'} X_{EQ' DZ'} + R^{EQ'}_{DZ' AW' BX'} X_{CY' EQ'}. \quad (4.5)$$

Legyen

$$X_{CY' DZ'} = \xi_C \xi_D \varepsilon_{Y'Z'}. \quad (4.6)$$

(4.5)-öt először  $\varepsilon^{W'Z'}$ -vel kontraháljuk és felhasználjuk a görbületi tenzor (3.10) előállítását:

$$-\nabla^{P'}_{(A} \nabla_{B)P'} (\xi_C \xi_D) = 4\Lambda \xi_{(C} \varepsilon_{D)(A} \xi_{B)} + 2\Psi_{ABE(C} \xi_{D)} \xi^E. \quad (4.7)$$

Alkalmazzuk a Leibnitz-szabályt a baloldali szorzat deriválására. Rendezés után így írható fel a baloldal:

$$-\xi_C \nabla^{P'}_{(A} \nabla_{B)P'} \xi_D - \xi_D \nabla^{P'}_{(A} \nabla_{B)P'} \xi_C. \quad (4.8)$$

Abból a célból, hogy  $\xi_C$ -ben lineáris összefüggéshez jussunk, szorozzuk  $\eta^C \eta^D$ -vel, ahol  $\eta^C$  tetszőleges spinor. A közös (és tetszőleges)  $(\xi_C \eta^C) \eta^D$  faktor elhagyásával ezt kapjuk:

$$\nabla^{P'}_{(A} \nabla_{B)P'} \xi_C = -\Psi_{ABCD} \xi^D + 2\Lambda \xi_{(A} \varepsilon_{B)C}. \quad (4.9)$$



A Ricci-identitásokból nyerhető másik spinorrelációt hasonló módon vezetjük le (4.5)-ből  $\varepsilon^{AB}$ -vel történő kontrakció útján, végeredményben:

$$\nabla_{H(W')}\nabla_{X'}^H\zeta_D = \Phi_{DEW'X'}\zeta^E. \quad (4.10)$$

(4.9) és (4.10) azonosságokból és komplex konjugáltjukból a többindexes spinorokra vonatkozó megfelelő azonosságok minden nehézség nélkül megkaphatók.

Minthogy a Bianchi-identitások spinoralakjának levezetése elvben nem tartalmaz semmi újat a Ricci-identitáshoz képest, itt most csak a végeredményt közöljük. A Bianchi-identitásokból is két spinorösszefüggést kapunk, amelyek a görbületi tenzor (3.10) spinorfelbontásában szereplő mennyiségekre vonatkoznak:

$$\nabla_{Y'}^D\Psi_{ABCD} = \nabla_{(C}^{Z'}\Phi_{AB)Y'Z'}, \quad (4.11)$$

$$\nabla^{BZ'}\Phi_{ABY'Z'} = -3\nabla_{AY'}\Lambda. \quad (4.12)$$

(4.9—12) azonosságok az Einstein-féle gravitációs egyenletektől függetlenül fennállnak; levezetésük során csupán a Riemann-geometriában mindig érvényes Bianchi- és Ricci-identitásokat használtuk. (3.9) Einstein-egyenletek a gravitációelmélet spinormegfogalmazásában oly módon jutnak szerephez, hogy a görbületi tenzor (3.10) spinorfelbontásában a (3.12) összefüggéssel definiált  $\Phi_{ABC'D'}$  spinort és a  $\Lambda = R/24$  skalárt rögzítik le a fenti azonosságokban. Ha az anyageloszlás ismert ( $T_{\mu\nu}$  energiainpulzus-tenzor adott), az Einstein-egyenletek tisztán algebrai feltételt jelentenek  $\Phi_{ABC'D'}$  és  $\Lambda$  mennyiségekre. Például üres térben ( $T_{\mu\nu}=0$ ) az Einstein-egyenletek tartalma az, hogy  $\Phi_{ABC'D'}$  és  $\Lambda$  eltűnik (4.9—12) azonosságokban, vagyis

$$\nabla_{(A}^{P'}\nabla_{B)P'}\zeta_C = -\Psi_{ABCD}\zeta^D \quad (4.13)$$

$$\nabla_{H(W')}\nabla_{X'}^H\zeta_D = 0 \quad (4.14)$$

$$\nabla_{Y'}^D\Psi_{ABCD} = 0 \quad (4.15)$$

és (4.12) azonosan teljesül. (4.15) a zérus nyugalmi tömegű, kétkomponensű neutrinóra érvényes

$$\nabla_{Y'}^D\zeta_D = 0 \quad (4.16)$$

Weyl-egyenlet [51] általánosítása görbült térben a gravitációs teret jellemző négyindexes  $\Psi_{ABCD}$  spinorra.

## 5. A spin koefficiensek módszere

1962-ben Newman és Penrose spinormódszerek felhasználásával a gravitációs egyenleteket olyan alakra hozta, amely a gravitációelmélet számos problémájának megoldását tette lehetővé [33]. Az általuk kidolgozott eljárás ezen túlmenően parciális differenciálegyenletekre vezető egyéb problémák tárgyalására is alkalmazható [36]. A következő fejezetekben sűrűn hivatkozunk majd a Newman—Penrose egyenletekre. Ez indokoltá teszi, hogy összefoglalóan ismertetessük a módszer alapjait.

A komplex, két dimenziós spintérben Newman és Penrose [33] nyomán bevezetjük a lineárisan független  $o_A$  és  $\iota_A$  bázis-spinorokat. A normálást úgy választjuk, hogy

$$o_A\iota^A = 1 \quad (5.1)$$

teljesüljön. A bázist alkotó spinor „diád” összefoglaló jelölésére  $o_A$  és  $\iota_A$  alábbi alternatív elnevezését használjuk:

$$\zeta_{oA} = o_A, \quad \zeta_{\iota A} = \iota_A. \quad (5.2)$$

A diádindexeket az  $abc$  elejéről választott latin kisbetűkkel jelölve <sup>1</sup>,

$$\zeta_{aA} = (o_A, \iota_A), \quad a = 0, 1. \quad (5.3)$$

Rögzített  $a$  index azt mutatja meg, hogy  $\zeta_{aA}$  bázis melyik elemét írtuk le. Nyilvánvaló, hogy spintérben végrehajtott transzformációk alkalmával  $a$  index változatlanul leírandó.

Tetszőleges spinor kifejezhető a bázison képzett skalár vetületeinek összegeként. Tekintsük például  $Y_{AB'C}$  spinort. Diádkomponenseit a következőképpen alkotjuk meg:

$$Y_{ab'c} = Y_{AB'C} \zeta_a^A \bar{\zeta}_{b'}^{B'} \zeta_c^C. \quad (5.4)$$

Az  $Y_{ab'c}$  diádvetületek definíció szerint invariáns skalárok. Az (5.1)-ből származó

$$\zeta_{aA} \zeta^{aB} = \delta_A^B \quad (5.5)$$

összefüggés lehetővé teszi (5.4) invertálását:

$$Y_{AB'C} = -\zeta_A^a \bar{\zeta}_{B'}^{b'} \zeta_C^c Y_{ab'c}. \quad (5.6)$$

(Diádkomponensekkel számolva nem szabad elfelejtenünk, hogy összegző diád-indexek áthelyezése is előjelváltást okoz).

A spintérben bevezetett bázis a négydimenziós világban komplex, fényszerű vektorokból felépülő bázist (*null tetrádot*) definiál az alábbi összefüggéseknek megfelelően:

$$l^\mu = \sigma_{AB'}^\mu o^A \bar{o}^{B'}, \quad n^\mu = \sigma_{AB'}^\mu \iota^A \bar{\iota}^{B'}, \quad (5.7)$$

$$m^\mu = \sigma_{AB'}^\mu o^A \bar{\iota}^{B'}, \quad \bar{m}^\mu = \sigma_{AB'}^\mu \iota^A \bar{o}^{B'}.$$

$\sigma_{AB'}^\mu$  összekötő mennyiségek hermiticitásából következik, hogy  $l^\mu$  és  $n^\mu$  bázisvektorok valósak,  $m^\mu$  vektor pedig komplex. (3.22) levezetés mintájára igazolhatjuk, hogy a bázisvektorok fényszerűek.

A null tetrád jelölésére használjuk még a következő összefoglaló írásmódot:

$$Z_0^\mu = l^\mu, \quad Z_1^\mu = n^\mu, \quad Z_2^\mu = m^\mu, \quad Z_3^\mu = \bar{m}^\mu \quad (5.8)$$

vagy másképpen <sup>1</sup>,

$$Z_m^\mu = (l^\mu, n^\mu, m^\mu, \bar{m}^\mu), \quad m = 0, 1, 2, 3. \quad (5.9)$$

$\sigma_{AB'}^\mu$  mennyiségek (1.16) tulajdonságából kapjuk, hogy a tetrádvektorok az alábbi ortogonalitási tulajdonságokkal rendelkeznek:

$$[Z_{m\mu} Z_n^\mu] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.10)$$

Itt a

$$Z_{m\mu} Z_n^\mu = g_{\mu\nu} Z_m^\mu Z_n^\nu \equiv g_{mn} \quad (5.11)$$



skalárszorzat  $g_{\mu\nu}$  metrikus tenzor tetrádkomponenseit szolgáltatja, hiszen általában a tenzorok tetrádkomponenseit a bázisvektorokkal történő kontrakció útján nyerjük. A tetrádkomponensek koordinátatranszformációkkal szemben skalárok-ként viselkednek [33]. (5.10) szerint a metrikus tenzor tetrádkomponensei konstansok.

Megjegyezzük, hogy a null tetrád elemei a szokásos valós, ortonormált

$$V_m^\mu = (T^\mu, X^\mu, Y^\mu, Z^\mu) \quad (5.12)$$

vektorbázissal (l. A) Függelék) így fejezhetők ki:

$$\sqrt{2}l^\mu = T^\mu + Z^\mu, \quad \sqrt{2}n^\mu = T^\mu - Z^\mu, \quad \sqrt{2}m^\mu = X^\mu + iY^\mu. \quad (5.13)$$

A spinor diád és a null tetrád elemei között fennálló (5.7) alakú kapcsolat folytán a spinorkifejezések diádvétületei ekvivalens módon tetrádvétületekként is értelmezhetők.

Komplex Ricci-féle rotációs koeficienseket definiálunk a következőképpen:

$$\gamma_{mnp} \stackrel{\text{def}}{=} Z_{m\mu; \nu} \cdot Z_n^\mu Z_p^\nu. \quad (5.14)$$

$\gamma_{mnp}$  rotációs koeficiensek antiszimmetrikusak az  $(m, n)$  indexpárban,

$$\gamma_{mnp} = -\gamma_{nmp}. \quad (5.15)$$

A Riemann-tenzor tetrádkomponensei kifejezhetők a rotációs koeficiensek segítségével [13].

$$R_{mnpq} = \gamma_{mnp; q} - \gamma_{mnq; p} + \gamma_{mq}^l \gamma_{lnp} - \gamma_{mp}^l \gamma_{lnq} + \gamma_{mn}^l (\gamma_{pq}^l - \gamma_{qp}^l). \quad (5.16)$$

Itt a

$$\partial_m = Z_m^\mu \partial_\mu \quad (5.17)$$

skalár deriválóoperátorokat az indexben röviden pontosvesszővel jelöltük<sup>1</sup>.

Könnnyen levezethetjük a  $\varphi$  invariáns skalárra ható  $\partial_m$  operátorok kommutációs törvényét:

$$\varphi_{;m;n} - \varphi_{;n;m} = (\gamma_{mn}^l - \gamma_{nm}^l) \varphi_{;l}. \quad (5.18)$$

A későbbiekben felhasználjuk majd a (4.2) Bianchi-identitások tetrádvétületeit,

$$R_{mn[pq;r]} = \gamma_{m[r}^l R_{pq]ln} - \gamma_{n[r}^l R_{pq]lm} + 2R_{mnl[p} \gamma_{rq]}^l. \quad (5.19)$$

A megfelelő diádreleációkat a 4. fejezetben levezetett spinorazonosságokból kapjuk. A rotációs koeficiensekkel ekvivalens diádkifejezéseket Newman és Penrose [33] spin koeficienseknek nevezték el, és az alábbi definíciókkal vezették be ezeket:

$$\Gamma_{abcd} \stackrel{\text{def}}{=} \zeta_{Aa; \mu}^{\zeta} \zeta_b^A \sigma_{CD}^\mu \bar{\zeta}_{d'}^{D'} \zeta_c^C. \quad (5.20)$$

A spin koeficiensek szimmetrikusak első indexpárjukban:

$$\Gamma_{abcd} = \Gamma_{bacd}. \quad (5.21)$$

$\nabla_{AB'}$  spinoroperátorok diádkomponensei:

$$\nabla_{ab'} = \zeta_a^A \bar{\zeta}_{b'}^{B'} \nabla_{AB'} = \sigma_{ab'}^\mu \nabla_\mu. \quad (5.22)$$

A továbbiakban mindig skalárookra hatunk a differenciálással, ezért írhatjuk:  $\nabla_{ab'} = \partial_{ab'}$ . A deriváló operátorok kommutációs törvénye:

$$(\partial_{ab'} \partial_{cd'} - \partial_{cd'} \partial_{ab'}) \varphi = [\varepsilon^{pq} (\Gamma_{pacd'} \partial_{qb'} - \Gamma_{pcab'} \partial_{qd'}) + \\ + \varepsilon^{r's'} (\bar{\Gamma}_{r'b'd'e} \partial_{as'} - \bar{\Gamma}_{r'd'b'a} \partial_{cs'})] \varphi. \quad (5.23)$$

A Ricci-identitások (4.9), (4.10) spinoralakjának diádvetületei szolgáltatják az (5.16)-nak megfelelő diádegyenleteket:

$$\partial_{fe'} \Gamma_{acdb'} - \partial_{db'} \Gamma_{acfe'} = \varepsilon^{pq} (\Gamma_{apdb'} \Gamma_{qcfe'} + \Gamma_{acpb'} \Gamma_{qdf'e'} - \\ - \Gamma_{apfe'} \Gamma_{qcdb'} - \Gamma_{acpe'} \Gamma_{gfdb'}) + \varepsilon^{r's'} (\Gamma_{acdr'} \bar{\Gamma}_{s'b'e'f} - \Gamma_{acfr'} \bar{\Gamma}_{s'e'b'd}) + \\ + \Psi_{acdf} \varepsilon_{e'b'} + \Lambda \varepsilon_{e'b'} (\varepsilon_{cd} \varepsilon_{af} + \varepsilon_{ad} \varepsilon_{cf}) + \Phi_{acb'} \varepsilon'_{ef} \varepsilon_{fd}. \quad (5.24)$$

(5.19) diádekvivalensét (4.11) és (4.12) spinoridentitásokból kapjuk:

$$\partial^p_{d'} \Psi_{abcp} - \partial^{t'}_{(c} \Phi_{ab)} \partial^{t'}_{t'} = 3 \Psi_{pr(ab} \Gamma_c)^{pr}_{d'} + \Psi_{abcp} \Gamma^p_r{}^{r}_{d'} - \\ - 2 \Gamma^p_{(ab} \Gamma_c)^{t'}_{pt'} \partial^{t'}_{d'} - \bar{\Gamma}_{t'd'v'} (a \Phi_{bc})^{t'v'} + \bar{\Gamma}_{t'v'v'} (a \Phi_{bc})^{t'}_{d'} \quad (5.25)$$

és

$$3 \partial_{ab'} \Lambda + \partial^{pr'} \Phi_{apb't'} = \varepsilon^{v'w'} (\Phi_{ap}{}^{t'}_{w'} \bar{\Gamma}_{b't'v'}{}^p + \\ + \Phi_{apb'}{}^{t'} \bar{\Gamma}_{t'w'v'}{}^p) - (\Phi_{prb'}{}^{t'} \Gamma_a{}^{pr}_{t'} + \Phi_{apb'}{}^{t'} \Gamma^p_r{}^{r}_{t'}). \quad (5.26)$$

A Newman—Penrose módszer lényeges vonása, hogy az összefüggésekben valamennyi szummázás részletesen kialakítható, és a kapott egyenletek viszonylag egyszerű szerkezetűek. Érdekes ezért a fenti relációkban a diádkomponenseket egyedi jelöléssel is ellátni. A diád- és tetrádirásmód között fennálló, (5.8) relációkra épülő kapcsolat lehetővé teszi, hogy a kétfajta értelmezést a célszerűségnek megfelelően felváltva használjuk. A skalár vetületek egyedi jelölését ezért mind a diádkomponensekre, mind a tetrádkomponensekre megadjuk. A spin koefficiensek:

$ab$	00	01 vagy 10	11
$cd'$			
00'	$\kappa$	$\varepsilon$	$\sigma$
10'	$\varrho$	$\alpha$	$\lambda$
01'	$\sigma$	$\beta$	$\mu$
11'	$\tau$	$\gamma$	$\nu$

$$\Gamma_{abcd'} = \quad (5.27)$$

A komplex rotációs koefficiensek és spin koefficiensek kapcsolata:

$$\kappa = l_{\mu;v} m^\mu l^\nu \quad \alpha = \frac{1}{2} (l_{\mu;v} n^\mu \bar{m}^\nu - m_{\mu;v} \bar{m}^\mu \bar{m}^\nu)$$

$$\pi = -n_{\mu;v} \bar{m}^\mu l^\nu \quad \beta = \frac{1}{2} (l_{\mu;v} n^\mu m^\nu - m_{\mu;v} \bar{m}^\mu m^\nu)$$



$$\begin{aligned}
\rho &= l_{\mu; \nu} m^\mu \bar{m}^\nu & \gamma &= \frac{1}{2} (l_{\mu; \nu} n^\mu n^\nu - m_{\mu; \nu} \bar{m}^\mu n^\nu) \\
\lambda &= -n_{\mu; \nu} \bar{m}^\mu \bar{m}^\nu & \varepsilon &= \frac{1}{2} (l_{\mu; \nu} n^\mu l^\nu - m_{\mu; \nu} \bar{m}^\mu l^\nu) \\
\sigma &= l_{\mu; \nu} m^\mu m^\nu & \nu &= -n_{\mu; \nu} \bar{m}^\mu n^\nu \\
\mu &= -n_{\mu; \nu} \bar{m}^\mu m^\nu & \tau &= l_{\mu; \nu} m^\mu n^\nu
\end{aligned} \tag{5.28}$$

$\Psi_{abcd}$  és  $\Phi_{abc'd'}$  diádvetületeket célszerű az azonos típusú indexekben megjelenő egyesek (1) számának feltüntetésével jelölni:

$$\begin{aligned}
\Psi_0 &= \Psi_{0000} = -C_{\alpha\beta\gamma\delta} l^\alpha m^\beta l^\gamma m^\delta \\
\Psi_1 &= \Psi_{0001} = -C_{\alpha\beta\gamma\delta} l^\alpha n^\beta l^\gamma m^\delta
\end{aligned} \tag{5.29}$$

$$\Psi_2 = \Psi_{0011} = -\frac{1}{2} C_{\alpha\beta\gamma\delta} (l^\alpha n^\beta l^\gamma n^\delta - l^\alpha n^\beta m^\gamma \bar{m}^\delta)$$

$$\Psi_3 = \Psi_{0111} = C_{\alpha\beta\gamma\delta} l^\alpha n^\beta n^\gamma \bar{m}^\delta$$

$$\Psi_4 = \Psi_{1111} = -C_{\alpha\beta\gamma\delta} n^\alpha \bar{m}^\beta n^\gamma \bar{m}^\delta, \tag{5.29}$$

illetőleg

$$\Phi_{00} = \Phi_{000'0'} = -\frac{1}{2} R_{00}$$

$$\Phi_{01} = \Phi_{000'1'} = -\frac{1}{2} R_{02}$$

$$\Phi_{02} = \Phi_{001'1'} = -\frac{1}{2} R_{22}$$

$$\Phi_{10} = \bar{\Phi}_{01}$$

$$\Phi_{11} = \Phi_{010'1'} = -\frac{1}{4} (R_{10} + R_{32}) \tag{5.30}$$

$$\Phi_{12} = \Phi_{011'1'} = -\frac{1}{2} R_{21}$$

$$\Phi_{20} = \bar{\Phi}_{02}$$

$$\Phi_{21} = \bar{\Phi}_{12}$$

$$\Phi_{22} = \Phi_{111'1'} = -\frac{1}{2} R_{11}$$

$$\Lambda = R/24.$$

A skalár differenciáloperátorok egyedi elnevezései:

$$\begin{aligned} D &= \partial_{00'} = l^\mu \partial_\mu, \\ \Delta &= \partial_{11'} = n^\mu \partial_\mu, \\ \delta &= \partial_{01'} = m^\mu \partial_\mu, \\ \bar{\delta} &= \partial_{10'} = \bar{m}^\mu \partial_\mu. \end{aligned} \tag{5.31}$$

$D$  és  $\Delta$  valós operátorok:  $D = \bar{D}$  és  $\Delta = \bar{\Delta}$ .

A most bevezetett jelölésmódban részletesen kiírjuk a korábban kapott diád-összefüggéseket. (5.23) kommutátorok részletes alakja:

$$\begin{aligned} (\Delta D - D\Delta)\varphi &= [(\gamma + \bar{\gamma})D + (\varepsilon + \bar{\varepsilon})\Delta - (\tau + \bar{\pi})\bar{\delta} - (\bar{\tau} + \pi)\delta]\varphi \\ (\delta D - D\delta)\varphi &= [(\bar{\alpha} + \beta - \bar{\pi})D + \kappa\Delta - \sigma\bar{\delta} - (\bar{\varrho} + \varepsilon - \bar{\varepsilon})\delta]\varphi \\ (\delta\Delta - \Delta\delta)\varphi &= [(\bar{\nu}D + (\tau - \bar{\alpha} - \beta)\Delta + \bar{\lambda}\bar{\delta} + (\mu - \gamma + \bar{\gamma})\delta)]\varphi \\ (\bar{\delta}\delta - \delta\bar{\delta})\varphi &= [(\bar{\mu} - \mu)D + (\bar{\varrho} - \varrho)\Delta - (\bar{\alpha} - \beta)\bar{\delta} - (\bar{\beta} - \alpha)\delta]\varphi \end{aligned} \tag{5.32}$$

Az (5.24) Ricci-identitások:

$$D\sigma - \bar{\delta}\kappa = (\varrho^2 + \sigma\bar{\sigma}) + (\varepsilon + \bar{\varepsilon})\varrho - \bar{\kappa}\tau - \kappa(3\alpha + \bar{\beta} - \pi) + \Phi_{00} \tag{5.33a}$$

$$D\sigma - \delta\kappa = (\varrho + \bar{\varrho})\sigma + (3\varepsilon - \bar{\varepsilon})\sigma - (\tau - \bar{\pi} + \bar{\alpha} + 3\beta)\kappa + \Psi_0 \tag{5.33b}$$

$$D\tau - \Delta\kappa = (\tau + \bar{\pi})\varrho + (\bar{\tau} + \pi)\sigma + (\varepsilon - \bar{\varepsilon})\tau - (3\gamma + \bar{\gamma})\kappa + \Psi_1 + \Phi_{01} \tag{5.33c}$$

$$D\alpha - \bar{\delta}\varepsilon = (\varrho + \bar{\varepsilon} - 2\varepsilon)\alpha + \beta\bar{\sigma} - \bar{\beta}\varepsilon - \kappa\lambda - \bar{\kappa}\gamma + (\varepsilon + \varrho)\pi + \Phi_{10} \tag{5.33d}$$

$$D\beta - \delta\varepsilon = (\alpha + \pi)\sigma + (\bar{\varrho} - \bar{\varepsilon})\beta - (\mu + \gamma)\kappa - (\bar{\alpha} - \bar{\pi})\varepsilon + \Psi_1 \tag{5.33e}$$

$$D\gamma - \Delta\varepsilon = (\tau + \bar{\pi})\alpha + (\bar{\tau} + \pi)\beta - (\varepsilon + \bar{\varepsilon})\gamma - (\gamma + \bar{\gamma})\varepsilon + \tau\pi - \nu\kappa + \Psi_2 - \Delta + \Phi_{11} \tag{5.33f}$$

$$D\lambda - \bar{\delta}\pi = (\varrho\lambda + \bar{\sigma}\mu) + \pi^2 + (\alpha - \bar{\beta})\pi - \nu\bar{\kappa} - (3\varepsilon - \bar{\varepsilon})\lambda + \Phi_{20} \tag{5.33g}$$

$$D\mu - \delta\pi = (\bar{\varrho}\mu + \sigma\lambda) + \bar{\pi}\pi - (\varepsilon + \bar{\varepsilon})\mu - \pi(\bar{\alpha} - \beta) + \Psi_2 - \nu\kappa + 2\Delta \tag{5.33h}$$

$$D\nu - \Delta\pi = (\pi + \bar{\tau})\mu + (\bar{\pi} + \tau)\lambda + (\gamma - \bar{\gamma})\pi - (3\varepsilon + \bar{\varepsilon})\nu + \Psi_3 + \Phi_{21} \tag{5.33i}$$

$$\Delta\lambda - \bar{\delta}\nu = -(\mu + \bar{\mu})\lambda - (3\gamma - \bar{\gamma})\lambda + (3\alpha + \bar{\beta} + \pi - \bar{\tau})\nu - \Psi_4 \tag{5.33j}$$

$$\delta\varrho - \bar{\delta}\sigma = \varrho(\bar{\alpha} + \beta) - \sigma(3\alpha - \bar{\beta}) + (\varrho - \bar{\varrho})\tau + (\mu - \bar{\mu})\kappa - \Psi_1 + \Phi_{01} \tag{5.33k}$$

$$\delta\alpha - \bar{\delta}\beta = (\mu\varrho - \lambda\sigma) + \alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta} - 2\alpha\beta + \gamma(\varrho - \bar{\varrho}) + \varepsilon(\mu - \bar{\mu}) - \Psi_2 + \Delta + \Phi_{11} \tag{5.33l}$$

$$\delta\lambda - \bar{\delta}\mu = (\varrho - \bar{\varrho})\nu + (\mu - \bar{\mu})\pi + \mu(\alpha + \bar{\beta}) + \lambda(\bar{\alpha} - 3\beta) - \Psi_3 + \Phi_{21} \tag{5.33m}$$

$$\delta\nu - \Delta\mu = (\mu^2 + \lambda\bar{\lambda}) + (\gamma + \bar{\gamma})\mu - \bar{\nu}\pi + [\tau - 3\beta - \bar{\alpha}]\nu + \Phi_{22} \tag{5.33n}$$

$$\delta\gamma - \Delta\beta = (\tau - \bar{\alpha} - \beta)\gamma + \mu\tau - \sigma\nu - \varepsilon\bar{\nu} - \beta(\gamma - \bar{\gamma} - \mu) + \alpha\bar{\lambda} + \Phi_{12} \tag{5.33o}$$

$$\delta\tau - \Delta\sigma = (\mu\sigma + \bar{\lambda}\varrho) + (\tau + \beta - \bar{\alpha})\tau - (3\gamma - \bar{\gamma})\sigma + \Phi_{02} - \kappa\bar{\nu} \tag{5.33p}$$

$$\Delta\varrho - \bar{\delta}\tau = -(\varrho\bar{\mu} + \sigma\lambda) + (\bar{\beta} - \alpha - \bar{\tau})\tau + (\gamma + \bar{\gamma})\varrho + \nu\kappa - \Psi_2 - 2\Delta \tag{5.33r}$$

$$\Delta\alpha - \bar{\delta}\gamma = (\varrho + \varepsilon)\nu - (\tau + \beta)\lambda + (\bar{\gamma} - \bar{\mu})\alpha + (\bar{\beta} - \bar{\tau})\gamma - \Psi_3 \tag{5.33s}$$



Általános esetben az (5.25), (5.26) Bianchi-identitások részletesen kiírva igen komplikált kifejezéseket tartalmaznak, ezért itt megelégszünk az üres térre vonatkozó Bianchi-identitások felírásával. Ekkor  $\Phi_{abc'd'} = \Lambda = 0$ . Megjegyezzük, hogy vákuumban (5.26)-ban valamennyi tag eltűnik. Ezért a forrásmentes esetben a Bianchi-identitások részletes alakja a következő:

$$\begin{aligned}
 D\Psi_1 - \bar{\delta}\Psi_0 &= -3\kappa\Psi_2 + [2\varepsilon + 4\varrho]\Psi_1 - [-\pi + 4\alpha]\Psi_0 \\
 D\Psi_2 - \bar{\delta}\Psi_1 &= -2\kappa\Psi_3 + 3\varrho\Psi_2 - [-2\pi + 2\alpha]\Psi_1 - \lambda\Psi_0 \\
 D\Psi_3 - \bar{\delta}\Psi_2 &= -\kappa\Psi_4 - [2\varepsilon - 2\varrho]\Psi_3 + 3\pi\Psi_2 - 2\lambda\Psi_1 \\
 D\Psi_4 - \bar{\delta}\Psi_3 &= -[4\varepsilon - \varrho]\Psi_4 + [4\pi + 2\alpha]\Psi_3 - 3\lambda\Psi_2 \\
 \Delta\Psi_0 - \delta\Psi_1 &= [4\gamma - \mu]\Psi_0 - [4\tau + 2\beta]\Psi_1 + 3\sigma\Psi_2 \\
 \Delta\Psi_1 - \delta\Psi_2 &= \nu\Psi_0 + [2\gamma - 2\mu]\Psi_1 - 3\tau\Psi_2 + 2\sigma\Psi_3 \\
 \Delta\Psi_2 - \delta\Psi_3 &= 2\nu\Psi_1 - 3\mu\Psi_2 + [-2\tau + 2\beta]\Psi_3 + \varrho\Psi_4 \\
 \Delta\Psi_3 - \delta\Psi_4 &= 3\nu\Psi_2 - [2\gamma + 4\mu]\Psi_3 + [-\tau + 4\beta]\Psi_4.
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

A Newman—Penrose módszer szellemében — az (5.34) felírásakor követett eljárás általánosításával — (5.32) és (5.33) azonosságokra is kirójuk az Einstein-feltételeket:  $\Phi_{abc'd'}$  és  $\Lambda$  mennyiségeknek a (3.9) gravitációs egyenletekből kapott alakját írjuk az azonosságokba. Speciálisan, üres térben mindenhol  $\Phi_{abc'd'} = \Lambda = 0$  helyettesítendő. Elektrovákuumba (III. fejezet)  $\Phi_{mn} = k\Phi_m\bar{\Phi}_n$ , ahol  $m$  és  $n$  indexek a 0, 1 és 2 értékeket veszik fel.

A Newman—Penrose egyenletek rendkívül előnyös tulajdonsága, hogy *szemléletes geometriai jelentéssel* rendelkeznek. A továbbiakban a Newman—Penrose egyenletekben szereplő spin koeficiensek geometriai tartalmával foglalkozunk.

$\kappa$  spin koeficiens az  $l^\mu$  érintő vektorral megadott fényszerű görbesereg főgörbületét jellemzi:

$$l_{\mu;\nu}l^\nu = -\kappa\bar{m}_\mu - \bar{\kappa}m_\mu + (\varepsilon + \bar{\varepsilon})l_\mu. \tag{5.35}$$

Ha  $\kappa=0$ ,  $l^\mu$  geodetikus görbesereg érintő vektora. Ekkor ugyanis a görbe menti paraméter alkalmas átskálázásával, illetőleg az ezzel ekvivalens  $l^\mu \rightarrow \varphi l^\mu$  skálatranszformációval  $\varepsilon + \bar{\varepsilon}$  zérussá tehető.  $\varepsilon + \bar{\varepsilon}=0$ -ra  $l_{\mu;\nu}l^\nu=0$ , tehát a görbék affin paraméterezéssel láttuk el. Ebben az esetben

$$\varrho = \frac{1}{2}(-l^\mu_{;\mu} + i \operatorname{rot} l^\mu) \tag{5.36}$$

ahol  $^J$

$$\operatorname{rot} l^\mu \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2}l_{[\mu;\nu]}l^{\mu;\nu}. \tag{5.37}$$

$\varrho$  valós része adja meg a geodetikus nyaláb divergenciáját, képzetes része pedig a rotációt.  $\sigma$  spin koeficiens a geodetikus görbesereg komplex nyírása [48], amelyre:

$$\sigma\bar{\sigma} = \frac{1}{2} \left[ l_{(\mu;\nu)}l^{\mu;\nu} - \frac{1}{2}(l_{;\mu}{}^\mu)^2 \right]. \tag{5.38}$$

$l_\mu$  vektor  $n_\mu$  irányában vett kovariáns deriváltját az alábbi összefüggés adja meg:

$$l_{\mu;\nu} n^\nu = -\tau \bar{m}_\mu - \bar{\tau} m_\mu + (\gamma + \bar{\gamma}) l_\mu. \quad (5.39)$$

$l^\mu \rightarrow \varphi l^\mu$  alakú skálatranszformációval (5.39)-ben  $\gamma + \bar{\gamma}$  eliminálható.  $\tau$  azt mutatja meg tehát, hogyan fordul el  $l_\mu$  vektor, ha  $n_\mu$  irányában elmozdulunk.

$l^\mu$  vektort geodetikus nyaláb érintő vektorának választva az (5.10) ortogonalitási feltételeket nem rontjuk el, ha a tetrád fennmaradó elemeire a nyaláb mentén a geodetikus terjedés követelményét rójuk ki:

$$n_{\mu;\nu} l^\nu = m_{\mu;\nu} l^\nu = 0. \quad (5.40)$$

E választással

$$\kappa = \varepsilon = \pi = 0. \quad (5.41)$$

A tetrádvektorokat (5.40)-től eltérő módon is elterjeszthetjük a nyaláb mentén. Egy lehetséges, (5.40)-től különböző tetrádválasztással foglalkozunk majd a II. részben.

Sok esetben célszerű  $l^\mu$  vektort a gravitációs tér *sugaraival* párhuzamosnak választani (a sugar fogalmának meghatározását I. a 3. fejezetben). Ekkor [33]

$$\Psi_0 = 0. \quad (5.42)$$

Ha a Petrov típus algebrailag speciális és  $l^\mu$  vektor többszörös null főiránnyal párhuzamos, akkor (5.29) értelmében teljesülnek a

$$\Psi_0 = \Psi_1 = 0 \quad (5.43)$$

relációk. A Newman—Penrose formalizmus ily módon alkalmas a sugarak és a Petrov típus tanulmányozására. Segítségével elegáns bizonyítás adható [33] a Petrov-osztályozással kapcsolódó Goldberg—Sachs tételre.

**Goldberg-Sachs tétel:** *Forrásmentes gravitációs tér akkor és csak akkor algebrailag speciális, ha tartalmaz nyírástmentes fényszerű geodetikus vonalsereget.*

E tételt későbbi hivatkozás céljából, bizonyítás nélkül idézzük. A bizonyítás megtalálható 33. hivatkozásban.

A Newman—Penrose egyenletek általában egzaktul megoldhatók, ha a sugarak geodetikusak. Geodetikus sugarakkal rendelkeznek csaknem az összes, fizikai interpretáció szempontjából jelentős, ismert egzakt megoldásai az Einstein-egyenleteknek. A geodetikus sugarakat tartalmazó terek osztályába tartoznak az algebrailag speciális terek is. A Goldberg—Sachs tétel értelmében algebrailag speciális terekre a sugarak nyírástmentesek. Fizikai alkalmazások szemszögéből az algebrailag speciális terek közül kétségtelenül a Kerr-megoldás [24] a legjelentősebb. Ennek speciális esete a Schwarzschild-tér, amely másrészt a Robinson—Trautman-megoldások [49] közé tartozik. A fizikailag jelentős algebrailag speciális megoldások közé tartoznak az  $N$  típusú síkhullámmegoldások is [26].

Newman és Tamburino [35] találták meg a nyírástmentesség feltételének elhagyásával, de  $q = \bar{q}$  feltétel megkövetelésével kapott Petrov I. típusú metrikákat. Eredményeiből az látszik, hogy a  $\sigma \neq 0$  feltétel a geodetikus sugarakat tartalmazó terek osztályát igen erősen leszűkíti. Az így kapott metrikák nem tartalmazzák



speciális esetként  $\sigma=0$ -ra a Kerr-, illetőleg Schwarzschild megoldásokat. Ezért a Newman—Tamburino megoldások fizikai jelentősége kétséges. Az általánosabb  $\varrho \neq \bar{\varrho}$ ,  $\sigma \neq 0$ ,  $\kappa = \Psi_0 = 0$  esetre találta *Unti* és *Torrence* [60] az alábbi tételt:

**Unti-Torrence tétel:** *A geodetikus sugarakkal jellemzett forrásmentes gravitációs terek szferikus, nyíró ( $\sigma \neq 0$ ) osztálya a Newman—Tamburino megoldásokon kívül más tereket nem tartalmaz.*

A szferikusság fogalmának definiálására képezzük  $\varrho$  és  $\sigma$  spin koefficiensekből az

$$\mathbf{M} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \varrho & \sigma \\ \bar{\sigma} & \bar{\varrho} \end{bmatrix}$$

$2 \times 2$ -es mátrixot. Ha  $\mathbf{M}$  szinguláris mátrix, akkor a  $\varrho$  és  $\sigma$  spin koefficiensekkel jellemzett görbesereget *cilindrikusnak* nevezzük [33]. A cilindrikusság speciális esete, ha  $\mathbf{M}$  mátrix maga is eltűnik. Ez a *síkhullámeset*. Ha  $\mathbf{M}$  reguláris, akkor a görbesereget *szferikusnak* nevezzük.

Cilindrikus sugarak olyan gravitációs tereket jellemeznek, amelyeket valamely, a térbeli végtelenbe kinyúló forrás kelt [60]. A cilindrikus terek ezért fizikailag nem realizáltak.

## II. RÉSZ

### STACIONÁRIUS GRAVITÁCIÓS TEREK

#### 1. Alapismeretek

Fizikai rendszerek stacionárius állapotának fogalmát az alábbi „naiv” definícióval vezethetjük be [59]:

**1. definíció:** *Stacionáriusnak nevezzük az állapotot, ha található olyan koordinátarendszer, amelyben a térmennyiségek nem függnek az időkoordinátától.*

Az általános relativitáselméletben megköveteljük, hogy a fizikai rendszerre vonatkozó megállapítások a használt koordinátáktól függetlenül érvényesek legyenek; ez a kovariancia elve. 1. definíció látszólag ellentmond a kovariancia követelményének, mivel a rendszer stacionáriusságát kitüntetett koordinátarendszer létezéséhez köti. Az alábbiakban ezért olyan meghatározást adunk a stacionáriusság fogalmára, amely a koordinátaválasztástól függetlenül érvényes.

Az 1. definíciókban használt koordinátarendszerben bevezetjük  $\xi^\mu$  időszerű vektorteret komponenseinek megadásával:

$$\xi^\mu = \delta_0^\mu. \quad (1.1)$$

A metrikus tenzor  $\xi^\mu$  téren képezett Lie-deriváltja\*:

$$L_\xi g_{\mu\nu} = \xi_{\mu;\nu} + \xi_{\nu;\mu}. \quad (1.2)$$

(1.1) koordinátafeltétel teljesülése esetén:

$$L_\xi g_{\mu\nu} = g_{\mu\nu,0}. \quad (1.3)$$

Ha a metrika stacionárius rendszert jellemez, (1.3) értelmében ezt írhatjuk:

$$L_\xi g_{\mu\nu} = 0, \quad (1.4)$$

ahonnan

$$\xi_{\mu;\nu} + \xi_{\nu;\mu} = 0. \quad (1.5)$$

Az (1.5) alakú *Killing-egyenlet*  $\xi_\mu$  megoldásait *Killing-vektoroknak* nevezzük.

**2. definíció:** *Stacionáriusnak mondjuk azt a rendszert, amelyre (1.5) Killing-egyenletnek létezik időszerű  $\xi_\mu$  megoldása, és valamennyi, a rendszerre jellemző fizikai mennyiség  $\xi_\mu$  téren vett Lie-deriváltja eltűnik.*

Legyen  $\Phi_\Omega$  tetszőleges fizikai mennyiség, amelynek indexeit összefoglalóan  $\Omega$ -vel jelöltük. Stacionárius állapotban, (1.5) egyenletet és a Lie-deriválás szabályait [59]

\* A Lie-derivált fogalmát ismertnek tételezzük fel. A következőkben a megértéshez elegendő az 59. hivatkozás ide vonatkozó fejezeteinek ismerete. A Lie-deriváltak elméletének beható tárgyalása és további alkalmazások találhatók a 63. hivatkozásban.



felhasználva, az (1.1) összefüggéssel megadott koordinátarendszerben kapjuk\*:

$$L_{\xi} \Phi_{\Omega} = \Phi_{\Omega,0} = 0. \quad (1.6)$$

(1.1) feltétel  $\xi^{\mu}$  vektorhoz *illesztett* koordinátarendszert határozza meg. A meghatározás nem egyértelmű. Most megkeressük az (1.1) feltétel érvényességét nem befolyásoló  $x^{\mu'}(x^{\nu})$  koordinátatranszformációkat. Ilyen transzformációkra

$$\xi^{\mu'} = \delta_0^{\mu'} = \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial x^{\nu}} \xi^{\nu} = \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial t} \quad t = x^0.$$

Részletesen kiírva,

$$\frac{\partial t'}{\partial t} = 1, \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial x^{i'}}{\partial t} = 0, \quad i' = 1, 2, 3. \quad (1.7')$$

(1.7') általános megoldása:

$$t' = t + F(x^j) \quad (1.8a)$$

$$x^{i'} = x^{i'}(x^j) \quad i', j = 1, 2, 3.$$

Megkapjuk az (1.1) feltételt változatlanul hagyó *megengedett transzformációk* legáltalánosabb alakját.

A stacionáriusság speciális esete a sztatikusság. Definíció szerint sztatikus a téridő, ha tartalmaz hiperfelületre merőleges időszerű Killing-vektorteret.

Tekintsük a

$$\sigma(x^{\mu}) = \text{konst} \quad (1.9)$$

feltétellel megadott hiperfelületereget. Minden egyes valós konst. értékre (1.9) hiperfelületet definiál a téridőben; az egyes  $\sigma(x^{\mu}) = \text{konst.}$  hiperfelületek térszerűek, ha a  $\sigma_{,\mu}$  gradiens vektor időszerű:

$$\sigma_{,\mu} \sigma_{,\nu} g^{\mu\nu} > 0. \quad (1.10)$$

$\xi_{\mu}$  vektor hiperfelületre merőleges, ha arányos valamely  $\sigma_{,\mu}$  gradiens vektorral:

$$\xi_{\mu} = \chi \sigma_{,\mu}. \quad (1.11)$$

(Itt  $\chi$  skalár arányossági tényező.) A hiperfelületre merőlegesség megfogalmazható úgy is, hogy nem hivatkozunk magára a hiperfelületre, csupán  $\xi_{\mu}$  vektortér tulajdonságaira.  $\xi_{\mu}$  Killing-tér hiperfelületre merőleges, ha vektorrotációja eltűnik<sup>J</sup>:

$$(\text{rot } \xi)^e \equiv \xi_{\lambda} \xi_{\mu;\nu} \varepsilon^{\lambda\mu\nu e} \sqrt{-g} = 0. \quad (1.12)$$

A bizonyítás egyik irányban nyilvánvaló:  $\xi_{\nu}$  vektor (1.11) alakja kielégíti (1.12) feltételt. A fordított állítás igazolására tekintsük az (1.12)-ből következő

$$\xi_{\lambda} \xi_{\mu;\nu} + \xi_{\nu} \xi_{\lambda;\mu} + \xi_{\mu} \xi_{\nu;\lambda} = 0 \quad (1.13)$$

\* Ilyen koordinátarendszer mindig létezik, a bizonyítást l. 13. hivatkozásban.

egyenletet,  $\xi^\nu$ -vel kontrahálunk és felhasználjuk (1.5) Killing-egyenletet:

$$\xi_\lambda(\xi^2)_{;\mu} - \xi_\mu(\xi^2)_{;\lambda} + \xi^2(\xi_{\mu;\lambda} - \xi_{\lambda;\mu}) = 0. \quad (1.14)$$

Itt  $\xi^2 = \xi_\nu \xi^\nu$ , ezért írhatjuk:

$$\frac{\partial}{\partial x^\lambda} \left( \frac{\xi_\mu}{\xi^2} \right) = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left( \frac{\xi_\lambda}{\xi^2} \right). \quad (1.15)$$

Létezik tehát olyan  $\sigma$  skalár függvény, amelyre

$$\frac{\xi_\lambda}{\xi^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x^\lambda}, \quad (1.16)$$

vagyis

$$\xi_\lambda = \xi^2 \sigma_{,\lambda}. \quad (1.17)$$

Ezzel az állítást bebizonyítottuk és (1.11)-ben az arányossági tényezőt is megkaptuk a Killing-vektor hosszával kifejezve:

$$\chi = \xi^2. \quad (1.18)$$

Vezessünk most be a Killing-vektorhoz illesztett koordinátákat. Ekkor (1.1) teljesül. (1.17)-ből:

$$g_{\lambda 0} = g_{\lambda \mu} \delta_0^\mu = g_{\lambda \mu} \xi^\mu = \xi_\lambda = \xi^2 \sigma_{,\lambda}. \quad (1.19)$$

Definíció szerint

$$\xi^2 = g_{\lambda \mu} \delta_0^\lambda \delta_0^\mu = g_{00}. \quad (1.20)$$

ezért

$$g_{\lambda 0} = g_{00} \sigma_{,\lambda}. \quad (1.21)$$

Ebből  $\lambda=0$ -val:

$$\sigma_{,0} = 1, \quad (1.22)$$

ahonnan

$$\sigma = t + F(x^i), \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.23)$$

$F(x^i)$  a koordináták tetszőleges függvénye.

Térjünk most át az alábbi koordináta-rendszerre:

$$\begin{aligned} t' &= \sigma = t + F(x^i), \\ x^{i'} &= x^i. \end{aligned} \quad (1.24)$$

E transzformáció (1.8) speciális esete, így (1.1) feltételt nem rontja el. (1.21)-ből az új koordináta-rendszerben kapjuk:

$$g_{i0} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.25)$$

Ezzel beláttuk a következő tételt:



Sztatikus téridőben mindig létezik olyan koordináta-rendszer, amelyben a metrika időfüggetlen és  $g_{i0}=0$ . Ezt a koordinátarendszert nevezzük a hiperfelületre merőleges Killing-vektorhoz illesztett koordinátarendszernek.

A metrikus tenzor transzformációs tulajdonságai alapján nem nehéz belátni, hogy az (1.25) feltétel érvényességét nem befolyásoló megengedett koordináta-transzformációk legáltalánosabb alakja:

$$\begin{aligned} t' &= at + b, & a, b \text{ konstansok,} \\ x^{i'} &= x^i(x^j) & i', j = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Sztatikus térben tehát a megengedett transzformációk készlete (1.8)-hoz képest leszűkül.

## 2. Háromdimenziós „relativitáselmélet”

Stacionárius gravitációs tereket vizsgálunk. Az időszerű Killing-vektortérhez illesztett koordinátákat használunk. A térmennyiségek ekkor nem függenek  $t=x^0$  koordinátától. A megengedett koordinátatranszformációk (1.8) alakúak.

Az általánosság megszorítása nélkül felvehetjük  $V_4$  stacionárius téridő  $ds^2$  ívelemnégyzetét<sup>1</sup> a következő alakban:

$$ds^2 = f(dt + \omega_i dx^i)^2 - f^{-1} ds^2, \quad (2.1)$$

ahol

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j. \quad (2.2)$$

$f$ ,  $\omega_i$  és  $g_{ij}$  térmennyiségek csak az  $x^i$  térszerű koordinátáktól függenek. (2.1) valóban a legáltalánosabb stacionárius ívelem, ugyanis  $V_4$  metrikus tenzorának alábbi átjelölésével kapjuk<sup>1</sup>:

$$\tilde{g}_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} -f^{-1}g_{ij} + f\omega_i\omega_j & f\omega_i \\ f\omega_j & f \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

(1.8b) alakú transzformációkkal, vagyis az új  $x^{i'}$  térszerű koordinátákra történő áttéréssel szemben definíció szerint  $f$  skalárként,  $\omega_i$  vektorként és  $g_{ij}$  szimmetrikus tenzorként viselkedik.  $g_{ij}$  ezért a háromdimenziós  $V_3$  tér metrikus tenzorának tekinthető.  $V_3$  teret (2.2) ívelemnégyzet definiálja. A II. Részben, valamint a Jelölésekben felsorolt további fejezetekben a  $V_4$  téren értelmezett mennyiségeket tildével látjuk el — ha szükséges —, megkülönböztetésül a  $V_3$  téren definiált objektumoktól.

Az időkoordináta (1.8a) alakú transzformációinak hatása a  $V_3$  téren értelmezett mennyiségekre mértéktranszformáció jellegű.  $f$  és  $g_{ij}$  invariánsak (1.8a)-val szemben,  $\omega_i$  pedig a következőképpen transzformálódik:

$$\omega'_i = \omega_i - F_{,i}. \quad (2.4)$$

F. J. Ernst nyomán [14] definiáljuk az  $\omega_i$  hármasektor rotációjával arányos

$$\varphi^i \stackrel{\text{def}}{=} \epsilon^{ijk} \omega_{j|k} (\sqrt{g})^{-1} f^2 \quad (2.5)$$

vektort<sup>1</sup>.  $\varphi^i$  mértékinvariáns és sztatikus esetben eltűnik. Utóbbi tulajdonsága következik abból, hogy alkalmas „időmértékben”<sup>1</sup> (l. (1.24) egyenletet)  $\tilde{g}_{i0} = f\omega_i = 0$ .

Megjegyzendő, hogy  $f$  skalár sehol sem zérus, minthogy időszerű Killing-vektor hossznégyzete:

$$f = \tilde{g}_{00} = \xi_\mu \xi^\mu > 0. \quad (2.6)$$

(2.5) definíció értelmében  $\varphi^i$  vektortér eleget tesz az alábbi differenciálegyenletnek:

$$f\varphi^i_{|i} = 2f_{;i}\varphi^i. \quad (2.7)$$

Az állítás igazolására szorozzuk át (2.5) összefüggést  $\sqrt{g}f^{-2}$ -vel és képezzük  $x^i$  szerint a parciális deriváltját:

$$(\sqrt{g}f^{-2}\varphi^i)_{;i} = e^{ijk}\omega_{j|k,i} = e^{ijk}\omega_{j,k,i} = 0. \quad (2.8)$$

Kovariáns jelölésben

$$(f^{-2}\varphi^i)_{|i} = 0. \quad (2.9)$$

Tényezőnként deriválva megkapjuk a bizonyítani kívánt (2.7) összefüggést.

*F. Ernst* [14, 16] megmutatta, hogy stacionárius gravitációs problémák igen előnyösen kezelhetők komplex jelölésmódban. Bevezetjük a komplex  $\mathcal{E}_i$  vektort:

$$\mathcal{E}_i \stackrel{\text{def}}{=} f_{;i} + i\varphi_i. \quad (2.10)$$

A  $V_4$  téren definiált Ricci-tenzor,  $\tilde{R}_{\mu\nu}$  felírható  $\mathcal{E}_i$  és  $V_3$  tér  $R_{ij}$  Ricci-tenzora segítségével:

$$\tilde{R}_{00} = -\frac{1}{2}(f\mathcal{E}^i_{|i} - \mathcal{E}^i \mathcal{E}_i) \quad (2.11a)$$

$$\varepsilon_{ijk}\tilde{R}^k_0\sqrt{g} = \frac{1}{2}if(\mathcal{E}_{i|j} - \mathcal{E}_{j|i}) \quad (2.11b)$$

$$g_{ik}g_{jl}(\tilde{R}^{kl} - g^{kl}\tilde{R}_{00}) = f^2R_{ij} + \frac{1}{4}(\mathcal{E}_i\bar{\mathcal{E}}_j + \bar{\mathcal{E}}_i\mathcal{E}_j). \quad (2.11c)$$

(2.11) azonosságok közvetlenül a Ricci-tenzor definíciója [13]<sup>1</sup> alapján levezethetők. A baloldalakon  $\tilde{R}_{\mu\nu}$  tenzorra kirójuk az

$$\tilde{R}_{\mu\nu} - \frac{1}{2}\tilde{g}_{\mu\nu}\tilde{R} = -kT_{\mu\nu} \quad (2.12)$$

Einstein-egyenleteket. Ily módon  $V_3$  téren értelmezett mennyiségekkel írjuk fel a stacionárius gravitációs egyenleteket.

Tekintsük például azt a fontos speciális esetet, ha anyag nincs jelen a vizsgált tartományban:  $T_{\mu\nu} = 0$ . A (2.12) Einstein-egyenletek szerint ekkor (2.11) összefüggések bal oldalára zérus irandó. (2.11b) így írható fel:

$$\mathcal{E}_{i|j} - \mathcal{E}_{j|i} = 0. \quad (2.13)$$

(2.13) értelmében vékuumban  $\mathcal{E}_i$  vektor rotációmentes, ezért létezik olyan  $\mathcal{E}$  skalár, amelyre

$$\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_{;i}. \quad (2.14)$$



$\mathcal{E}_i$  valós része,  $f_i$  gradiens vektor. (2.14) alapján vákuumban a képzetes rész is gradiens vektor,

$$\varphi_i = \varphi_{,i}. \quad (2.15)$$

(2.11a) és (2.11c) összefüggések üres térben\*:

$$\operatorname{Re} \mathcal{A} \mathcal{E} = \nabla \mathcal{E} \nabla \mathcal{E} \quad (2.16)$$

$$4(\operatorname{Re} \mathcal{E})^2 R_{ij} + \mathcal{E}_{,i} \overline{\mathcal{E}}_{,j} + \overline{\mathcal{E}}_{,i} \mathcal{E}_{,j} = 0. \quad (2.17)$$

(2.17) téregyenletből

$$R_{ij} - \frac{1}{2} g_{ij} R = -T'_{ij}. \quad (2.18)$$

ahol  $T'_{ij}$  az alábbi tenzorkifejezést jelöli:

$$T'_{ij} = \frac{\mathcal{E}_{,i} \overline{\mathcal{E}}_{,j} + \overline{\mathcal{E}}_{,i} \mathcal{E}_{,j} - g_{ij} \mathcal{E}_{,r} \overline{\mathcal{E}}^{,r}}{4(\operatorname{Re} \mathcal{E})^2}. \quad (2.19)$$

$V_3$  téren (2.18) egyenlet tartalma megegyezik a (2.12) gravitációs egyenletek  $V_4$  térre vonatkozó jelentésével. (2.18) jobb oldalán az  $\mathcal{E}$  tér első deriváltjait kvadratikus tartalmazó szimmetrikus tenzor áll. Formailag ezért  $V_3$  téren (2.18) összefüggés „relativitáselmélet” alapegyenletének tekinthető; a görbült, háromdimenziós  $V_3$  téren  $\mathcal{E}$  skaláris anyagi mezőként értelmezhető, amelynek energiaimpulzus-tenzora  $T'_{ij}$ .  $\mathcal{E}$  tér eleget tesz a (2.16) „mozgásegyenletnek”.

Ezek a vákuumesetből levont következtetések természetesen érvényesek tetszőleges stacionárius terekre: a gravitációs egyenletek felírhatók  $V_3$ -ban, és megjelenik a komplex  $\mathcal{E}_j$  tér ( $\mathcal{E}$  általában nem gradiens vektor). A négydimenziós gravitációs egyenletekből megkapjuk a háromdimenziós „relativitáselmélet” téregyenleteit  $\mathcal{E}_i$  tér mozgásegyenleteivel együtt.

Ennek a felismerésnek a jelentősége, hogy lehetővé válik a gravitációs problémák tárgyalására kidolgozott módszerek ismételt alkalmazása  $V_3$  térben. Így olyan eredményeket kaphatunk, amelyek a négy dimenziós tárgyalásban nem érhetők el ugyanezen módszerekkel. Abból a célból, hogy a programnak ezt az általános megfogalmazását jobban megvilágítsuk, példaképpen előrebocsátjuk, hogy a spin koefficiensek módszerének alkalmazása  $V_3$  térben lehetővé teszi a stacionárius Einstein-egyenletek új egzakt megoldásainak levezetését. Egy másik példa a gravitációs terek invariáns osztályozása, amelynek háromdimenziós változata szintén új eredményekre vezet (l. a következő fejezetet). Megjegyezzük, hogy a vákuum (2.16) és (2.18) téregyenletei variációs módszerrel levezethetők; a megfelelő Lagrange-függvény:

$$L = R + \frac{1}{2} \frac{\nabla \mathcal{E} \nabla \overline{\mathcal{E}}}{(\operatorname{Re} \mathcal{E})^2}. \quad (2.20)$$

Célszerű olykor  $\mathcal{E}$  skalár helyett a

$$\xi = \frac{1 + \mathcal{E}}{1 - \mathcal{E}} \quad (2.21)$$

\*  $V_3$  térben  $\Delta$  a kovariáns Laplace-operátor (másodfajú Beltrami-operátor [45]),  $\Delta f \stackrel{\text{def}}{=} f_{|i|j} g^{ij}$  és  $\nabla$  a gradiens jele:  $(\nabla f)_i \stackrel{\text{def}}{=} f_{,i}$ .

térmennyiséget bevezetni (l. például III. 2. fejezetet). A téregyenletek  $\xi$ -re vonatkozó alakja:

$$(\xi \bar{\xi} - 1) \Delta \xi = 2 \bar{\xi} \nabla \xi \nabla \bar{\xi} \quad (2.22)$$

$$R_{ij} - \frac{1}{2} g_{ij} R = \frac{\xi'_{,i} \bar{\xi}'_{,k} + \bar{\xi}'_{,i} \xi'_{,k} - g_{ik} \xi'_{,r} \bar{\xi}'_{,r}}{(\xi \bar{\xi} - 1)^2}. \quad (2.23)$$

Általános ( $T_{\mu\nu} \neq 0$ ) esetben is használhatók a komplex

$$G_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathcal{G}_i}{2 \operatorname{Re} \mathcal{G}} \quad (2.24)$$

vektor segítségével felírt stacionárius téregyenletek.  $G_i$  bevezetésével (2.11) azonos-ságok alakja így módosul:

$$-f^{-2} \tilde{R}_{00} = G^i_{|i} + (\bar{G}_i - G_i) G^i \quad (2.25a)$$

$$-i \varepsilon_{ijk} f^{-2} \tilde{R}_0^k \sqrt{g} = G_{i|j} - G_{j|i} + G_i \bar{G}_j - \bar{G}_i G_j \quad (2.25)$$

$$f^{-2} (g_{ik} g_{jl} \tilde{R}^{kl} - g_{ij} \tilde{R}_{00}) = R_{ij} + G_i \bar{G}_j + \bar{G}_i G_j. \quad (2.25c)$$

Ismét megköveteljük a (2.12) Einstein-feltételek teljesülését  $\tilde{R}_{\mu\nu}$ -re (2.25) összefüggésekben.

Teljesség kedvéért és későbbi hivatkozás céljából felírjuk itt még a görbületi tenzor 3+1 dimenziós felbontását vákuumesetre (mindig üres térben használjuk majd a görbületi tenzor alábbi felbontását). Komplex jelölésmódot vezetünk be. Legyen  $F_{\mu\nu}$  tetszőleges antiszimmetrikus tenzor:

$F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$ . Az  $F^{ij}$  és  $F^k_0$  típusú komponenseket a következőképpen egyesítjük:

$$F^*_{ij} = F^{kl} g_{ik} g_{jl} - i \varepsilon_{ijk} F^k_0 \sqrt{g}. \quad (2.26)$$

A görbületi tenzor spurjai üres térben eltűnnek. A független komponensek egyesíthetők az antiszimmetrikus indexpárok (2.26) minta szerint történő komplex írásmódjával. (2.25) összefüggésekkel  $R_{\lambda\mu\nu\rho}$  3+1 dimenziós felbontására ezt kapjuk:

$$\frac{1}{2} f^{-3} \tilde{R}^*_{ijkl} = \varepsilon_{ijr} \varepsilon_{kls} Q^{rs} g. \quad (2.27)$$

Itt  $\tilde{R}^*_{ijkl}$ -l jelöltük a görbületi tenzornak az antiszimmetrikus indexpárok (2.26) mintájú egyesítésével kapott komplex komponenseit, és bevezettük a

$$Q_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} G_{j|i} + (2G_i + \bar{G}_i) G_j - g_{ij} G_r G^r \quad (2.28)$$

jelölést. (2.25)-ből  $\tilde{R}_{\mu\nu} = 0$  helyettesítésével kapjuk, hogy  $Q_{ij}$  szimmetrikus, spurmentes tenzor.

### 3. Invariáns osztályozás

A gravitációs terek Petrov-féle invariáns osztályozása a Weyl-tenzor algebrai tulajdonságai alapján történik. A négydimenziós  $V_4$  téridőben a gravitációs tér szerkezete a Weyl-tenzorral jellemezhető (I. 3. fejezet). Stacionárius esetre szorít-



kozva, a módszert most három dimenzióban,  $V_3$  téren kívánjuk alkalmazni. Háromdimenziós térben a Weyl-tenzor azonosan eltűnik [13] és  $R_{ijkl}$  görbületi tenzor kifejezhető az  $R_{ij}$  Ricci-tenzorral:

$$R_{ijkl} = g_{il}R_{jk} - g_{ik}R_{jl} + g_{jk}R_{il} - g_{jl}R_{ik} - \frac{1}{2}(g_{il}g_{jk} - g_{ik}g_{jl})R. \quad (3.1)$$

Most belátjuk, hogy anyagmentes esetben ( $T_{\mu\nu}=0$ )  $R_{ij}$  eltűnéséből az is következik, hogy  $V_4$  Minkowski-tér. (2.25c) szerint ekkor  $G_i=0$ . (2.28)-ból ezért  $Q_{ij}=0$  adódik, és (2.27) szerint  $V_4$  görbületi tenzora eltűnik. Ebből az állítás következik.

$R_{ij}$  tenzor a fentiek szerint egyértelműen jellemzi  $V_3$  tér görbületét és csak Minkowski-térben tűnik el. Az invariáns osztályozást célszerű ezért  $R_{ij}$  algebrai tulajdonságaira felépíteni. Irreducibilis részekre bontjuk  $R_{ij}$  tenzort:

$$R_{ij} = P_{ij} + \frac{1}{3}g_{ij}R. \quad (3.2)$$

Itt  $P_{ij}$   $V_3$  térben spurmentes és szimmetrikus tenzor.

Vizsgáljuk a  $P_{ij}$  tenzorra vonatkozó sajátérték-problémát:

$$P_i^j v_j = \lambda v_i. \quad (3.3)$$

ahol  $v_j$  a  $\lambda$  sajátértékhez tartozó sajátvektor. (3.3) karakterisztikus egyenlete:

$$\det [P_i^j - \lambda \delta_i^j] = 0. \quad (3.4)$$

(3.4) egyenletet megoldjuk  $\lambda$ -ra és felhasználjuk a (2.25c)-ből vákuumban kapott

$$R_{ij} + G_i \bar{G}_j + \bar{G}_i G_j = 0 \quad (3.5)$$

összefüggést. Ezzel anyagmentes térre a

$$\lambda_0 = \frac{2}{3} G_i \bar{G}^i.$$

$$\lambda_{\pm} = -\frac{1}{3} G_i \bar{G}^i \pm |G_i \bar{G}^i| \quad (3.6b)$$

sajátértékeket kapjuk.  $P_i^j$  spurmentes tenzor, így sajátértékeinek összege zérus:

$$\lambda_0 + \lambda_+ + \lambda_- = 0. \quad (3.7)$$

A stacionárius gravitációs terek invariáns osztályozása  $\lambda$  sajátértékek tulajdonságain alapul. A fizikailag realiztikus egzakt megoldások [10, 45] két alaptípus valamelyikébe sorolhatók. A degenerált típus (röviden  $D$  típus) sajátértékeire teljesül az alábbi összefüggés:

$$\lambda_0 = \lambda_+ = -2\lambda_-. \quad (3.8)$$

Az algebrailag általános típusra (jele:  $G$ ) (3.7)-en kívül más megszorítás nem áll fenn.

A továbbiakban feltehetjük, hogy a tér forrásmentes; ekkor a sajátértékek (3.6) alakban adóttak. Megvizsgáljuk a degeneráció feltételét. (3.8)-ból kapjuk:

$$(G_i \bar{G}^i)^2 = (G_i G^i)(\bar{G}_j \bar{G}^j). \quad (3.9)$$

Definiáljuk **A** és **B** vektorok kovariáns vektori szorzatát:

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{ijk} A^j B^k \sqrt{g}. \quad (3.10)$$

A vektori szorzat tulajdonságai alapján (3.9)-ből:

$$(\mathbf{G} \times \overline{\mathbf{G}})^2 = 0. \quad (3.9')$$

$\mathbf{G} \times \overline{\mathbf{G}}$  vektor tisztán képzetes, ezért (3.10) szerint  $\mathbf{G} \times \overline{\mathbf{G}} = 0$ , vagy  $G_i$  vektor (2.24) definíciója értelmében

$$\text{grad } f \times \text{grad } \varphi = 0. \quad (3.11)$$

(3.11) a degeneráció feltétele vákuumesetben. A sztatikus terek, melyekre  $\varphi = 0$ , (3.11) feltételt kielégítik. Ezért a sztatikus forrásmentes gravitációs terek osztályozásunkban *D típusúak*. A külső Schwarzschild-tér például sztatikus és forrásmentes ( $T_{\mu\nu} = 0$  értelemben), tehát *D* típusú\*.

Nemsztatikus esetben (3.11) feltétel azt jelenti, hogy  $f$  és  $\varphi$  skalárok funkcionális kapcsolatban vannak. Ez utóbbi feltevessel Papapetrou megoldotta a téregyenleteket [38]. A Papapetrou-metrikák azonban fizikai alkalmazások szempontjából nem jelentősek, mivel nem tartalmaznak tömegmonopólustagot. A gyenge tér-közelítésben végzett vizsgálatok [57] azt mutatják, hogy realisztikus források metrikus tenzorában a tömegmonopólus-tag nem tűnik el. Az alábbiakban röviden kitérünk ennek megvilágítására.

A forrástól nagy távolságban a téridő görbültsége kicsiny, ezért itt bevezethető olyan koordináta-rendszer, amelyben a metrika — infinitezimális tagoktól eltekintve — megegyezik a Minkowski-metrikával. Definiáljuk itt

$$r \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{x^{1^2} + x^{2^2} + x^{3^2}} \quad (3.12)$$

radiális koordinátát. Lense és Thirring eredménye szerint  $r$  koordináta segítségével a metrikus tenzor aszimptotikus alakja:

$$\tilde{g}_{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{2m}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) & & & 0 \\ & -1 - \frac{2m}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) & & \\ & & -1 - \frac{2m}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) & \\ & & & -1 - \frac{2m}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

Itt  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right)$  az  $1/r$ -ben magasabb rendű tagokat jelöli,  $m$  a forrás össztömege.  $m/r$  a tömegmonopólus-tag. Nagy  $r$  értékekre a Schwarzschild-metrika is (3.13) alakú,

\* Az itt tárgyalt invariáns osztályozás típusjelölései nem tévesztendőek össze a Petrov-típusokkal. Megemlítjük, hogy a Schwarzschild-tér a Petrov-osztályozásban is a *D* típusú terek közé tartozik, általában azonban a forrásmentes sztatikus terek a Petrov-osztályozásban nem *D* típusúak.



ezért mondhatjuk, hogy véges kiterjedésű források tere nagy távolságban a Schwarzschild-alakhoz tart.

A forrásmentes gravitációs egyenleteknek egyetlen olyan stacionárius ( $\varphi \neq 0$ ) megoldása ismeretes, amely megfelelő aszimptotikus viselkedésű; ez a Kerr-tér. Ívelemnégyzete:

$$d\bar{s}^2 = \left(1 - \frac{2mr}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}\right) (dt + a \sin^2 \vartheta d\varphi)^2 - 2(dt + a \sin^2 \vartheta d\varphi)(dr + a \sin^2 \vartheta d\varphi) - (r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta)(d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2). \quad (3.14)$$

A (3.14) Kerr-megoldás tengelyszimmetrikus és a Petrov-osztályozásban  $D$  típusú. A gyenge tér-közelítéssel való összehasonlítás azt mutatja [24], hogy  $m$  tömeggel és  $m \cdot a$  impulzusmomentummal rendelkező test külső gravitációs terét adja meg.\*  $a=0$  speciális esetben (3.14) így írható:

$$d\bar{s}^2 = \left(1 - \frac{2m}{r}\right) dt^2 - 2dr dt - r^2(d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2). \quad (3.15)$$

A Schwarzschild-tér ívelemnégyzetét kaptuk *null koordinátákban* [36]. Schwarzschild-koordinátákra a

$$dt' = dt - \frac{dr}{1 - \frac{2m}{r}}$$

$$dr' = dr, \quad d\vartheta' = d\vartheta, \quad d\varphi' = d\varphi \quad (3.16)$$

transzformációval térhetünk át, ahol az új (Schwarzschild-féle) koordinátákat vesszövel láttuk el.

Most elvégezzük a Kerr-metrika  $3+1$  dimenziós felbontását. (3.14) metrikus tenzora nem függ  $t$  koordinátától, tehát a vonalelemet az időszerű Killing-vektorhoz illesztett (1.1) koordinátarendszerben írtuk fel. Közvetlenül megkapjuk a (2.1) felbontást:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & a \sin^2 \vartheta \\ 0 & r^2 - 2mr + a^2 \cos^2 \vartheta & 0 \\ a \sin^2 \vartheta & 0 & (r^2 - 2mr + a^2) \sin^2 \vartheta \end{bmatrix},$$

$$f = 1 - \frac{2mr}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}, \quad x^1 = r, \quad x^2 = \vartheta, \quad x^3 = \varphi,$$

$$f\omega_i = \left(-1, 0, -\frac{2mar \sin^2 \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}\right). \quad (3.17)$$

$\mathcal{E}$  komplex skalár (2.14) definíciójából:

$$\mathcal{E} = 1 - \frac{2m}{r + ia \cos \vartheta}. \quad (3.18)$$

\* A forrás lehetséges szerkezete e munka elkészültekor még nem ismeretes.

$\lambda$  sajátértékeket (3.6) összefüggésekből számolhatjuk ki. Felhasználjuk  $G_i$  vektor (2.24) alakját. Az eredmények [43]:

$$\begin{aligned}\lambda_0 &= \frac{2}{3} \frac{m^2}{(r^2 - 2mr + a^2 \cos^2 \vartheta)^2} \left( 1 + \frac{2a^2 \sin^2 \vartheta}{r^2 - 2mr + a^2 \cos^2 \vartheta} \right), \\ \lambda_{\pm} &= -\frac{1}{3} \frac{m^2}{(r^2 - 2mr + a^2 \cos^2 \vartheta)^2} \left( 1 \mp 3 + \frac{2a^2 \sin^2 \vartheta}{r^2 - 2mr + a^2 \cos^2 \vartheta} \right).\end{aligned}\quad (3.19)$$

(3.8) feltételek az általános  $m \neq 0$ ,  $a \neq 0$  esetben nem teljesülnek a sajátértékekre. Azt kaptuk tehát, hogy a Kerr-tér a *háromdimenziós osztályozásban*  $G$  típusú. (3.19) összefüggésekből az is látszik, hogy az  $m=0$  esetben a sajátértékek eltűnnek, tehát  $m \rightarrow 0$ -ra a Kerr-megoldás a görbületlen Minkowski-térbe megy át. Az  $a \rightarrow 0$  határ esetben kapott Schwarzschild-tér (3.19) szerint — korábbi megállapításainkkal összhangban — a háromdimenziós osztályozásban  $D$  típusú.

#### 4. Spinorkalkulus

A háromdimenziós relativitási elv lehetővé teszi, hogy a  $V_4$ -re kidolgozott spinormódszereket (I. Rész)  $V_3$  térben ismét alkalmazzuk. Jelen fejezet célja a spinorkalkulus megalapozása görbült háromdimenziós térben. Az alkalmazásokat a következő fejezetekben tárgyaljuk.

Stacionárius téridőket tekintünk az időszerű Killing-vektorhoz illesztett koordinátarendszerben.  $g_{\mu\nu}$  metrikus tenzor nem függ  $t$  koordinátától. Idézzük fel a spinorok és tenzorok közti kapcsolatot megteremtő hermitikus mennyiségek (I. 1.12) definiáló egyenletét<sup>1</sup>:

$$\sigma_{\mu AC'} \sigma_{\nu B}{}^{C'} + \sigma_{\nu AC'} \sigma_{\mu B}{}^{C'} = g_{\mu\nu} \varepsilon_{AB}. \quad (4.1)$$

Itt  $q_{\mu\nu}$  tenzor  $t$ -független. Ezért, ha adott  $t=t_0$ -ra  $\sigma_{\mu AC'}$  megoldása (4.1) egyenletnek, akkor ugyanezen  $\sigma_{\mu AC'}$  tetszőleges más  $t$  értékre is megoldás. Más szavakkal: feltehetjük, hogy  $\sigma_{\mu AC'}$  nem függ  $t$  koordinátától [44].

A  $\sigma_{\mu AC'}$  mennyiségekkel kontrahált  $\xi^\mu$  időszerű Killing-vektor stacionárius téridőben hozzárendelést létesít a vesszős és vesszőtlen spinorkomponensek között. A Killing-vektorhoz illesztett koordinátarendszerben:

$$\xi^\mu \sigma_{\mu AC'} = \sigma_{0 AC'}. \quad (4.2)$$

$\sigma_{0 AC'}$  invariáns segítségével tetszőleges  $\xi^A$  spinorhoz a

$$\xi^{+A} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \bar{\xi}_{B'} \quad (4.3)$$

adjungált spinort rendeljük.\*

\*  $\left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right]$  egy speciális ábrázolása a  $2 \times 2$ -es egységmátrix. Az (I. 1.1) spintranszformációk a téridő rögzített pontjában az  $SL(2, C)$  csoport definiáló ábrázolását alkotják. Azok a spintranszformációk, amelyek a  $2 \times 2$ -es egységmátrix alakját nem rontják el, az  $SU(2)$  alcsoportot alkotják. Ha stacionárius terekben  $SU(2)$  spintranszformációkra szorítkoznánk, akkor adjungálást tartalmazó kifejezésekben a  $\left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right]$  mátrixok helyett mindenütt egységmátrixot lehetne



Bevezetjük a csak vesszőtlen spinorindexeket tartalmazó  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségeket:

$$\sigma_{AB}^i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sqrt{2}}{f} \sigma_A^{iC'} \sigma_{0BC'}. \quad (4.4)$$

A  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségekre, valamint az adjungálás műveletére vonatkozó alapösszefüggésekhez (4.1) egyenlet 3 + 1 dimenziós dekompozíciójával jutunk el. A  $(\mu, \nu) = (0, 0)$  komponensből:

$$\sigma_{0AC'} \sigma_{0B}^{C'} = \frac{1}{2} f \varepsilon_{AB}. \quad (4.5)$$

A  $(\mu, \nu) = (i, 0)$  típusú komponensek tartalma az, hogy  $\sigma_{AB}^i$  a spinorindexekben szimmetrikus:

$$\sigma_{AB}^i - \sigma_{BA}^i = 0. \quad (4.6)$$

A  $(\mu, \nu) = (i, j)$  komponensekből:

$$\sigma_{iC}^A \sigma_{jB}^C + \sigma_{jC}^A \sigma_{iB}^C = g_{ij} \delta_B^A. \quad (4.7)$$

Ez a  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségekre vonatkozó összefüggés (4.1) háromdimenziós analógja.

Az

$$\varepsilon_{A[B} \varepsilon_{CD]} = 0 \quad (4.8)$$

azonosság segítségével kapjuk (4.7)-ből a következő igen hasznos formulát:

$$\sigma_{iAB} \sigma_{CD}^i = -\frac{1}{2} (\varepsilon_{AC} \varepsilon_{BD} + \varepsilon_{AD} \varepsilon_{BC}). \quad (4.9)$$

$[\sigma_A^{iB}]$  mennyiségek kielégítik az  $SU(2)$  csoport generátorainak kommutációs relációját (a bizonyítást 1. B. Függelékben):

$$\sigma_{iC}^A \sigma_{jB}^C - \sigma_{jC}^A \sigma_{iB}^C = \sqrt{2} i \varepsilon_{ijk} \sigma_B^{kA} \sqrt{g}. \quad (4.10)$$

Az *adjungálás szabályait* (4.5)-ből kapjuk. Egyindexes  $\xi^A$  spinor kétszer történő adjungálása a spinor előjelét megváltoztatja:

$$\bar{\xi}_A^{++} = -\bar{\xi}_A. \quad (4.11)$$

Spinorok skalárszorzatának komplex konjugáltja:

$$\bar{\xi}_A \bar{\eta}^{A'} = \xi_A^+ \eta^{+A'}. \quad (4.12)$$

írni. Ezzel az  $SU(2)$  spinoralgebra ismert szabályaihoz [54] jutnánk. (4.3) ekkor az  $SL(2, C) \rightarrow SU(2)$  kontrakciónak azt a szabályát tükrözi, amelynek ismert megfogalmazása szerint [54]  $SL(2, C)$  spinoralgebrából úgy jutunk az  $SU(2)$  algebrához, hogy a vesszőzött kovariáns spinorkomponenseket egyenlővé tesszük a vesszőtlen kontravariáns spinorkomponensekkel.

Említett előnyei ellenére itt nem szűkítjük le a spintranszformáció-csoportot  $SU(2)$ -re. Ezzel lehetővé válik módszerünknek a térszerű (és, esetleg, fényyszerű) Killing-vektorokra történő alkalmazása.

$\left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right]$  csak időszerű Killing-vektor esetében ábrázolható egységmátrixszal. Ha ezt az ábrázolást használjuk, a térszerű és fényyszerű Killing-vektorral jellemezhető tereket eleve kizárjuk az alkalmazásokból.

Ha a skalárszorzat egyik tényezője adjungált spinor,

$$\bar{\xi}^+_{A'} \bar{\eta}^{A'} = \eta^+_A \xi^A. \quad (4.13)$$

Definiáljuk  $\xi^A$  spinor normáját:

$$\|\xi\|^2 \stackrel{\text{def}}{=} \xi^+_{A'} \xi^A. \quad (4.14)$$

Stacionárius térben,  $\left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right]$  mennyiség ábrázolására az egységmátrixot választva,

$$\|\xi\|^2 = |\xi_0|^2 + |\xi_1|^2, \quad (4.15)$$

tehát a spinornorma valós és nemnegatív.

Többindexes spinorok meghatározott tulajdonsággal rendelkezhetnek adjungálás szempontjából.  $\varepsilon_{AB}$  önadjungált spinor:

$$\varepsilon^+_{AB} = \varepsilon_{AB}. \quad (4.16)$$

Tegyük fel, hogy valamely kétindexes  $\sigma_{AB}$  spinor adjungálás hatására előjelet vált,

$$\sigma^+_{AB} = -\sigma_{BA}. \quad (4.17)$$

Ez a tulajdonság  $\left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right]$  mátrix speciális ábrázolásában a hermitikusság szokásos feltételét adja vissza. Ekkor ugyanis  $\left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$  és (4.5) szerint

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = [\delta^B_A] = \left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_{0AC'} \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{BC'} \right] = \left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_{0AC'} \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_{0AC'} \right]. \quad (4.18)$$

Célszerű (4.17) tulajdonságot a vegyes indexű  $\sigma^B_A$  mennyiségen vizsgálni:

$$\begin{aligned} [\sigma^B_A] &= -[\sigma^+_{AB}] = - \left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_{0A}^{R'} \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{BS'} \bar{\sigma}_{R'S'} \right] = \\ &= \left[ \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_{0AR'} \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{BS'} \bar{\sigma}^{R'S'} \right] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} [\bar{\sigma}^{R'S'}] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = [\sigma^{R'S'}]^T. \end{aligned} \quad (4.19)$$

( $T$ -vel jelöltük a mátrix transzponáltját.) Ezzel megmutattuk, hogy (4.17) a hermitikusság általánosabb megfogalmazása.  $\sigma^i_{AB}$  mennyiségek (4.4) meghatározása alapján belátható, hogy rendelkeznek (4.17) tulajdonsággal.

A négydimenziós spinoranalízis (I. 2. fejezet) mintájára megalkotjuk a spinorok kovariáns differenciálási szabályait  $V_3$  térben. Definiáljuk a  $\xi^A$  egyindexes spinor kovariáns deriváltját:

$$\xi_{A|i} \stackrel{\text{def}}{=} \xi_{A,i} - \Gamma^B_{iA} \xi_B. \quad (4.20)$$



Itt  $\Gamma_{iA}{}^B$  a  $V_3$  téren értelmezett spinor affin kapcsolat.  $\Gamma_{iA}{}^B$  kifejezhető a  $\Gamma_{ij}{}^k$  Christoffel-szimbólumokkal és  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségekkel, ha a fundamentális spinor és  $\sigma_{AB}^i$  kovariáns deriváltjai eltűnnek:\*

$$\sigma_{AB|i}^i = \varepsilon_{AB|i} = 0. \quad (4.21)$$

$\Gamma_{iA}{}^B$  részletes alakja:

$$\Gamma_{iA}{}^B = -\frac{1}{2} \sigma_j{}^{BC} (\sigma_{AC,i}^j + \Gamma_{ik}{}^j \sigma_{AC}^k). \quad (4.22)$$

Későbbi felhasználás céljából kifejezzük a  $V_4$  téren bevezetett  $\tilde{\Gamma}_{\mu A}{}^B$  spinor affin kapcsolatot  $\Gamma_{iA}{}^B$ -vel. Ez elvben minden nehézség nélkül elvégezhető (I. 2.4) és (4.22) kifejezésekre támaszkodva. A számolás részletei azonban igen hosszadalmasak, ezért itt csak a végeredményeket adjuk meg:

$$\tilde{\Gamma}_{0A}{}^B = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \sigma_A^{jB} \mathcal{E}_j. \quad (4.23a)$$

$$\tilde{\Gamma}_{iA}{}^B = \Gamma_{iA}{}^B - \frac{1}{2\sqrt{2}} \omega_i \sigma_A^{jB} \mathcal{E}_j - \frac{i}{2\sqrt{2}} \varepsilon_{ijk} \frac{\mathcal{E}^j}{f} \sigma_A^{kB} \sqrt{g}. \quad (4.23b)$$

Többindexes spinorok kovariáns deriváltját úgy képezzük, hogy (4.20) összefüggést indexenként alkalmazzuk, és az így kapott tagokat összegezzük.

Az adjungált spinorok definíciójában szereplő  $\sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'}$  mennyiség kovariáns deriváltja eltűnik:

$$\left( \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right)_{|i} = 0. \quad (4.24)$$

A kovariáns deriválás tehát felcserélhető az adjungálás műveletével.\*\*

A spinoradjungálás a kétdimenziós komplex spintérben kitünteti a bázis diád (I. 5. fejezet) egy speciális választását. Stacionárius esetben a spinornorma pozitív szemidefinit, ezért mindig található olyan  $\eta_A$  spinor, amelyre

$$\eta_A \eta^{+A} = 1. \quad (4.25)$$

Legyen ugyanis  $\eta'_A$  tetszőleges spinor,  $\eta'_A \eta'^{+A} > 0$ . Ekkor az  $\eta_A = \frac{\eta'_A}{\sqrt{\eta'_A \eta'^{+A}}}$  spinor teljesíti (4.25) feltételt.

Az  $(\eta_A, \eta_A^+)$  diád a normált spinorbázis speciális esete. Jelölése:  $\eta_{0A} = \eta_A$ ,  $\eta_{1A} = \eta_A^+$ , vagy

$$\eta_{aA} = (\eta_A, \eta_A^+), \quad a = 0, 1. \quad (4.26)$$

\* Ezzel a spinoranalízis Penrose-féle változatát követjük (I. I. 2. fejezet).

\*\* Ez az eredmény a szerző korábbi publikációiban nem szerepel. 44. hivatkozásban mindössze arra történt utalás, hogy a kovariáns deriválás és adjungálás műveleteinek felcserélhetősége

$\left( \sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'} \right)_{|i}$  eltűnésén múlik.

I. 5. fejezetben bevezettük az általános, normált  $\zeta_{aA} = (o_A, l_A)$  bázist. A normált spinorbázisok általános transzformációja:

$$\zeta_{aA} = \alpha_a{}^b \eta_{bA}. \quad (4.27)$$

A normálás megőrződik, ha  $\alpha_a{}^b$  skalárok unimoduláris mátrix elemei:

$$\det [\alpha_a{}^b] = 1. \quad (4.28)$$

A továbbiakban célszerűnek mutatkozik a  $\zeta$  és  $\eta$  bázisok között az alábbi speciális alakú összefüggést feltételezni:

$$o_A = \left(\frac{2}{f}\right)^{1/4} \eta_A \quad (4.29)$$

$$l_A = \left(\frac{f}{2}\right)^{1/4} \eta_A^+. \quad (4.29)$$

Stacionárius esetben a (4.26) definícióval megadott  $\eta$  diádot  $SU(2)$  bázisnak nevezhetjük.  $\eta$  diád definíciója ugyanis feltételezi a spinoradjungálás műveletének létezését. Az adjungálással ellátott spinorkalkulus  $\left[\sqrt{\frac{2}{f}} \sigma_0^{AB'}\right]$  mátrix speciális ábrázolására szorítkozva az  $SU(2)$  spinorkalkulusba megy át (l. a lábjegyzetet a 208. oldalon).

A spinorok diádkomponenseiről mondottak (I. 5. fejezet) természetesen az  $\eta$ -diádra is vonatkoznak.  $\eta$ -diádkomponensek adjungálási szabályai a fenti definíciókból következnek. Példaképpen meghatározzuk egyindexes spinor  $\xi_a$  diádkomponenseinek adjungáltját:

$$\begin{aligned} (\bar{\xi}_0) &= \bar{\xi}^{A'} \bar{\eta}_{A'} = \xi^{+A} \eta_A^+ = \xi_1^+ \\ (\bar{\xi}_1) &= \bar{\xi}^{A'} \bar{\eta}_{A'}^+ = -\xi^{+A} \eta_A = -\xi_0^+. \end{aligned} \quad (4.30)$$

## 5. $SU(2)$ spin koefficiensek

A speciálisan megválasztott  $\eta_{aA} = (\eta_A, \eta_A^+)$  spinordiád  $V_3$  térben a bázisvektorok egy „triádját” határozza meg az alábbi összefüggéseknek megfelelően:

$$l_i = -\sqrt{2} \eta_A \eta_B^+ \sigma_i^{AB} = -\sqrt{2} \sigma_{i01} \quad (5.1a)$$

$$m_i = \eta_A \eta_B \sigma_i^{AB} = \sigma_{i00} \quad (5.1b)$$

$$\bar{m}_i = -\eta_A^+ \eta_B^+ \sigma_i^{AB} = -\sigma_{i11}. \quad (5.1c)$$



Összefoglaló jelölést<sup>J</sup> vezetünk be (5.1) vektorbázisra:

$$Z_{\mathbf{m}}^i = (l^i, m^i, \bar{m}^i), \quad \mathbf{m} = 0, +, -. \quad (5.2)$$

Az adjungálási szabályokból (4. fejezet) következik, hogy  $l_i$  valós vektor. A bázis ortogonalitási viszonyai  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségek (4.9) tulajdonságából adódnak:

$$[g_{mn}] = [Z_{mi} Z_n^i] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

Az (5.3) tulajdonságokkal ellátott komplex vektorbázis a szokásosabb ortonormált  $\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$  bázisból is megkonstruálható:

$$\mathbf{I} = \mathbf{Z} \quad (5.4)$$

$$\sqrt{2} \mathbf{m} = \mathbf{X} + i\mathbf{Y},$$

(5.3) összefüggés egyúttal a metrikus tenzor  $g_{mn}$  triádkomponenseit is megadja. Az inverz összefüggés a metrikus tenzor koordinátatérbeli komponenseit a bázisvektorokkal fejezi ki,

$$g_{ij} = Z_i^{\mathbf{m}} Z_j^{\mathbf{n}} g_{mn} = l_i l_j + m_i \bar{m}_j + \bar{m}_i m_j. \quad (5.5)$$

A  $V_4$  térben bevezetett (I. 5.9) vektorbázis 3+1 dimenziós felbontása végrehajtható az  $\eta$  és  $\zeta$  diádokat összekötő (4.29) reláció, továbbá  $l_i$  és  $m_i$  vektorok (5.1) definíciói segítségével:

$$\tilde{l}^\mu = [l^i, f^{-1} - l_j \omega^j] \quad (5.6a)$$

$$\tilde{m}^\mu = [\sqrt{f} [m^i, -m_j \omega^j]] \quad (5.6b)$$

$$\tilde{n}^\mu = -\frac{1}{2} f \tilde{l}^\mu + \xi^\mu. \quad (5.6c)$$

Az  $\tilde{n}^\mu$  és  $\tilde{l}^\mu$  vektorok között fenálló (5.6c) összefüggés  $\zeta$  diád (4.29) alakú speciális felvételét tükrözi.

Komplex rotációs koefficienseket definiálunk  $z_{\mathbf{m}}^i$  vektorokkal  $V_3$  térben:

$$\gamma_{\mathbf{mnp}} \stackrel{\text{def}}{=} Z_{\mathbf{m}i} Z_{\mathbf{n}}^i Z_{\mathbf{p}}^j. \quad (5.7)$$

$\gamma_{\mathbf{mnp}}$  antiszimmetrikus az első indexpárban,

$$\gamma_{\mathbf{mnp}} = -\gamma_{\mathbf{nmp}}. \quad (5.8)$$

A négydimenziós formalizmus mintájára (I. 5. fejezet) a rotációs koefficienseket külön jelöléssel is ellátjuk:

$$\gamma_{mnp} = \begin{array}{c|ccc} & mn & & & \\ \hline p & & -0 & +0 & + - \\ \hline 0 & \bar{\kappa} & \kappa & \varepsilon \\ + & \bar{\varrho} & \sigma & -\bar{\tau} \\ - & \bar{\sigma} & \varrho & \tau \end{array} \quad (5.9)$$

(5.8)-ból következik, hogy  $\kappa$ ,  $\varrho$ ,  $\sigma$  és  $\tau$  komplex rotációs koefficiensek,  $\varepsilon$  pedig tisztán képzetes.

Az  $SL(2, C)$  kalkulus mintájára (I. 5. fejezet)  $V_3$  térben bevezetjük az  $SU(2)$  spin koefficienseket:

$$\Gamma_{abcd} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_{aA|i} \eta_b^A \sigma_{cD}^i \eta_c^D \eta_d^D. \quad (5.10)$$

$\Gamma_{abcd}$  szimmetrikus  $(a, b)$  és  $(c, d)$  indexpárjában:

$$\Gamma_{abcd} = \Gamma_{bacd} \quad (5.11)$$

$$\Gamma_{abcd} = \Gamma_{abdc}.$$

Négy komplex és egy imaginárius független  $SU(2)$  spin koefficiens van. A rotációs- és spin koefficiensek kapcsolata az

$$\varepsilon^{pq} \sigma_{aq}^i \sigma_{ibp|j} = -2\eta_{aB|i} \eta_b^B \quad (5.12)$$

összefüggésből származik. (5.12) levezethető  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségek (4.9) tulajdonságából, segítségével az  $SU(2)$  spin koefficiensek így írhatók fel:

$$\Gamma_{abcd} = \begin{array}{c|ccc} & ab & & & \\ \hline cd & & 00 & 01 & 11 \\ & & & 10 & \\ \hline 00 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma & -\frac{1}{2} \bar{\tau} & \frac{1}{\sqrt{2}} \bar{\varrho} \\ 01 \} & -\frac{1}{2} \kappa & -\frac{1}{2\sqrt{2}} \varepsilon & -\frac{1}{2} \bar{\kappa} \\ 10 \} & & & \\ 11 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \varrho & -\frac{1}{2} \tau & -\frac{1}{\sqrt{2}} \bar{\sigma} \end{array} \quad (5.13)$$

Az  $SL(2, C)$  és  $SU(2)$  spin koefficiensek között fennálló összefüggéseket a spinor affin kapcsolat (4.23) felbontásával kapjuk:

$$\tilde{\kappa} = f^{-1/2}(\kappa - 2G_+)$$

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{1}{4}(2\varepsilon + G_0 - \bar{G}_0)$$

$$\tilde{\pi} = \frac{1}{2}\sqrt{f}\bar{\kappa}$$

$$\tilde{\varrho} = \varrho + G_0$$

$$\tilde{\sigma} = \sigma$$

$$\tilde{\tau} = -\frac{1}{2}\sqrt{f}\kappa$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{1}{4}\sqrt{f}(2\tau + G_- - \bar{G}_-)$$

$$\tilde{\beta} = -\frac{1}{4}\sqrt{f}(2\bar{\tau} + 3G_+ + \bar{G}_+)$$

$$\tilde{\gamma} = -\frac{1}{8}f(2\varepsilon - 3G_0 - \bar{G}_0)$$

$$\tilde{\lambda} = \frac{1}{2}f\bar{\sigma}$$

$$\tilde{\mu} = \frac{1}{2}f(\bar{\varrho} + G_0)$$

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{4}f^{3/2}(-\bar{\kappa} + 2G_-). \quad (5.14)$$

Geometriai jelentésüket illetően az  $SU(2)$  spin koefficiensek szoros analógiát mutatnak az  $SL(2, C)$  mennyiségekkel. Ezt azzal is kifejezésre juttattuk, hogy a kétfajta formalizmusban az egymásnak megfelelő spin koefficienseket azonos görög betűvel jelöltük (természetesen  $V_4$  téren a megkülönböztető tildézést alkalmazva<sup>1)</sup>).

$\kappa = -l_{ij}l^j m^i$  spin koefficiens az  $l^i$  érintő vektorral meghatározott  $V_3$  térbeli görbesereg főgörbületének vetülete  $m^i$  bázisvektorra. A főgörbület az  $l^i$  vektorra merőleges síkban fekszik, ezért  $\kappa$  egyértelműen jellemzi.  $\kappa$  akkor és csak akkor tűnik el, ha  $l^i$  geodetikus vonalsereg érintő vektora. Ebben az esetben  $\varrho$  valós része adja meg a nyaláb divergenciáját, képzetes része a rotációt,  $\sigma$  pedig a nyaláb



komplex nyírása az alábbi összefüggéseknek megfelelően:

$$\operatorname{Re} \varrho = -\frac{1}{2} l_{|i}^i \quad (5.15a)$$

$$\operatorname{Im} \varrho = \frac{1}{2} [(l_{|i|j} - l_{j|i}) l^{i|j}]^{1/2} \quad (5.15b)$$

$$|\sigma| = 2^{-1/2} \left[ l_{(i|j)} l^{i|j} - \frac{1}{2} (l_{|i}^i)^2 \right]^{1/2}. \quad (5.15c)$$

$\varepsilon = m_{i|j} \bar{m}^i l^j$  nem jellemző magának a görbeseregnek a geometriájára, csupán az  $(\mathbf{m}, \bar{\mathbf{m}})$  kísérő vektorok terjedési tulajdonságait határozza meg a görbék mentén.

## 6. A stacionárius téregyenletek új alakja

Ebben a fejezetben  $SU(2)$  spin koeficiensekkel írjuk fel a stacionárius gravitációs egyenleteket. A Newman—Penrose egyenletek I. 5. fejezetben bemutatott levezetését követjük.

Képezzük  $\tilde{R}_{\mu\nu}$  Ricci-tenzor (2.25) felbontásának triádvétületeit:

$$G_{|m}^m + \gamma_{mn}^n G^m - (G_m - \bar{G}_m) G^m = -\lambda \quad (6.1a)$$

$$G_{m|n} - G_{n|m} - \gamma_m^p{}_n G_p + \gamma_n^p{}_m G_p - \bar{G}_m G_n + \bar{G}_n G_m = -i\varepsilon_{mnp} \chi^p \quad (6.1b)$$

$$R_{mn} + G_m \bar{G}_n + \bar{G}_m G_n = 2\varphi_{mn}. \quad (6.1c)$$

Itt a négydimenziós téridő Ricci-tenzorának triádvétületeire bevezettük az alábbi jelöléseket:

$$f^{-2} \tilde{R}_{00} \stackrel{\text{def}}{=} \lambda \quad (6.2a)$$

$$f^{-2} \tilde{R}_0^p \stackrel{\text{def}}{=} \chi^p \quad (6.2b)$$

$$f^{-2} (\tilde{R}^{ij} - g^{ij} \tilde{R}_{00}) Z_{im} Z_{jn} \stackrel{\text{def}}{=} 2\varphi_{mn}. \quad (6.2c)$$

Megjegyezzük, hogy  $V_3$  térben  $\tilde{R}_{00}$  skalár,  $\tilde{R}_0^i$  vektor és  $\tilde{R}^{ij}$  szimmetrikus tenzor.

$V_3$  görbületi tenzorát (3.1) azonosság triádvétületeinek felhasználásával a Ricci-tenzor triádkomponenseivel fejezhetjük ki:

$$\begin{aligned} R_{mnpq} = & -g_{mp} R_{nq} + g_{mq} R_{np} - g_{nq} R_{mp} + g_{np} R_{mq} - \\ & -\frac{1}{2} (g_{mq} g_{np} - g_{mp} g_{nq}) R. \end{aligned} \quad (6.3)$$

A háromdimenziós Ricci-identitások triádalakja:

$$R_{mnpq} = \gamma_{mnp|q} - \gamma_{mnq|p} + \gamma_m^r{}_n \gamma_{rnp} - \gamma_m^r{}_n \gamma_{rnq} + \gamma_{mnr} (\gamma_{rpq} - \gamma_{qp}). \quad (6.4)$$

Itt az indexben függőleges vonallal jelöltük<sup>1</sup> a parciális deriválóoperátor  $\partial_m$  triádvétületeit;

$$\partial_m \stackrel{\text{def}}{=} Z_m^i \partial_i. \quad (6.5)$$

Például  $\gamma_{mnp}$  skalárok parciális deriváltjának triádkomponensei:

$$\gamma_{mnp|q} = Z_q^i \partial_i \gamma_{mnp}. \quad (6.6)$$

A tetszőleges  $\varphi$  skalárra ható  $\partial_m$  operátorok kommutátora:

$$\varphi|_m|_n - \varphi|_n|_m = (\gamma_m^r \gamma_n^r - \gamma_n^r \gamma_m^r) \varphi|_r. \quad (6.7)$$

$\partial_m$  operátorokat egyedi jelölésben is felírjuk.

$$\begin{aligned} \partial_0 &\equiv l^i \partial_i = D \\ \partial_+ &\equiv m^i \partial_i = \delta \\ \partial_- &\equiv \bar{m}^i \partial_i = \bar{\delta}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

A tetrádvektorok (5.6) felbontása összefüggéseket jelent Newman és Penrose (tildével megkülönböztetett) skalár operátorai és a most bevezetett operátorok között:

$$\tilde{D} = D, \quad \tilde{\delta} = \sqrt{f} \delta, \quad \Delta = -\frac{f}{2} D.$$

A térmennyiségek időfüggetlensége miatt itt elhagytuk az időderiválásokat.

A most kapott azonosságokban (6.8) és (5.9) jelölések segítségével az összes szummázásokat részletesen kiírjuk. (6.1a) és (6.1b) azonosságok részletes alakja:

$$\begin{aligned} DG_0 + \tilde{\delta}G_+ + \delta G_- - (\varrho + \bar{\varrho})G_0 + (\kappa - \bar{\tau})G_- + (\bar{\kappa} - \tau)G_+ - (G_0 - \bar{G}_0)G_0 - (G_+ - \\ - \bar{G}_+)G_- - (G_- - \bar{G}_-)G_+ = -\lambda \end{aligned} \quad (6.10a)$$

$$\tilde{\delta}G_0 - DG_- + \varrho G_- + \bar{\sigma}G_+ + \bar{\kappa}G_0 - \varepsilon G_- - \bar{G}_0 G_- + \bar{G}_+ G_0 = -\chi_- \quad (6.10b)$$

$$\delta G_0 - DG_+ + \sigma G_- + \bar{\varrho}G_+ + \kappa G_0 + \varepsilon G_+ - \bar{G}_0 G_+ + \bar{G}_+ G_0 = \chi_+ \quad (6.10c)$$

$$\tilde{\delta}G_+ - \delta G_- - \varrho G_0 - \tau G_+ + \bar{\varrho}G_0 + \bar{\tau}G_- - \bar{G}_+ G_- + \bar{G}_- G_+ = \chi_0. \quad (6.10d)$$

(6.4) Ricci-identitásokból (6.3) és (6.1c) helyettesítésével kapjuk:

$$D\sigma - \delta\kappa - \varepsilon\sigma - \bar{\tau}\kappa - \kappa^2 + \sigma(-\varepsilon - \bar{\varrho}) - \varrho\sigma + 2\Phi_{++} - 2G_+ \bar{G}_+ = 0 \quad (6.11a)$$

$$D\varrho - \delta\kappa + \tau\kappa - \kappa\bar{\kappa} - \sigma\bar{\sigma} - \varrho^2 + \Phi_{00} - G_0 \bar{G}_0 = 0 \quad (6.11b)$$

$$D\tau - \bar{\delta}\varepsilon + \kappa\bar{\sigma} - \varrho\bar{\kappa} + \tau\varepsilon - \varepsilon\bar{\kappa} + \bar{\tau}\bar{\sigma} - \tau\varrho + 2\Phi_{0-} - G_0 \bar{G}_- - \bar{G}_0 G_- = 0 \quad (6.11c)$$

$$\bar{\delta}\sigma - \delta\varrho - 2\tau\sigma - \kappa(\varrho - \bar{\varrho}) - 2\Phi_{0+} + \bar{G}_0 G_+ + G_0 \bar{G}_+ = 0 \quad (6.11d)$$

$$\delta\tau + \bar{\delta}\bar{\tau} + \sigma\bar{\sigma} - \varrho\bar{\varrho} - 2\tau\bar{\tau} + \varepsilon(\varrho - \bar{\varrho}) - \Phi_{00} + 2\Phi_{+-} + G_0 \bar{G}_0 - G_+ \bar{G}_- - \bar{G}_+ G_- = 0. \quad (6.11e)$$

$\partial_m$  operátorok (6.7) kommutátorából valós  $\varphi$  skalárra két összefüggéshez jutunk,

$$(D\delta - \delta D)\varphi = [(\bar{\varrho} + \varepsilon)\delta + \sigma\bar{\delta} + \kappa D]\varphi \quad (6.12a)$$

$$(\delta\bar{\delta} - \bar{\delta}\delta)\varphi = [\bar{\tau}\bar{\delta} - \tau\delta + (\bar{\varrho} - \varrho)D]\varphi. \quad (6.12b)$$

Eljárásunk figyelemre méltó előnye az  $SL(2, C)$  formalizmushoz képest (I. 5. fejezet), hogy a Newman—Penrose egyenleteknél lényegesen kevesebb összefüggést kapunk. A négydimenziós formalizmusban a Ricci-azonosságokból 18 független feltétel (I. 5.33) adódott a spin koefficiensekre. A megfelelő (6.11) összefüggések száma mindössze öt. A kommutátorok  $V_4$ -en négy azonosságot adnak (I. 5.32), itt viszont csak kettőt (6.12). A Bianchi-identitások (I. 5.34), (nyolc darab azonosság) a háromdimenziós formalizmusban egyáltalán nem szükségesek, mivel a Weyl-

tenzor azonosan eltűnik. Megjelenik azonban  $\mathbf{G}$  komplex tér és a  $\mathbf{G}$  tér triádkomponenseire vonatkozó (6.10) azonosságok.

A megfelelő négydimenziós összefüggések levezetésében előnyösebbnek mutatkozott a diádkomponenseket használni. Természetesen vektormódszerekkel is megkaphatók a Newman—Penrose egyenletek, azonban a számolás nehezebb, mint a diádkomponensekkel. A  $V_3$  térre vonatkozó fenti azonosságok levezetésekor triádaazonosságokból indultunk ki. Mint azt általános formalizmusban, itt is használhattunk volna spinormódszereket. A Newman—Penrose módszerrel ellentétben itt mégis egyszerűbbnek mutatkozott a vektorbázis használata.

A stacionárius gravitációs egyenletek új alakját úgy kapjuk, hogy (6.10—12) azonosságokban  $\Phi_{mn}$ ,  $\chi_m$  és  $\lambda$  mennyiségekre megköveteljük az Einstein-egyenletek teljesülését. Üres térben ( $\tilde{R}_{\mu\nu}=0$ ) például

$$\varphi_{mn} = \chi_m = \lambda = 0. \quad (6.13)$$

A gravitációs terek Petrov-osztályozása és a jelen értekezésben bevezetett invariáns osztályozás (3. fejezet, 1. továbbá 7. fejezet) kapcsolatának tanulmányozására igen hasznos  $V_4$  tér görbületi tenzorát  $SU(2)$  spin koefficiensekkel kifejezni. Itt most megelégszünk az üres tér görbületi tenzorának felírásával. Vákuumra  $\tilde{R}_{\lambda\mu\nu\rho} = C_{\lambda\mu\nu\rho}$ , ezért elegendő meghatározni  $\Psi_A$  komplex skalárokat (I. 5.29). A módszert  $\Psi_0$  példáján mutatjuk be. (I. 5.33b)-ből:

$$\Psi_0 = \tilde{D}\tilde{\sigma} - \tilde{\delta}\tilde{z} - (\tilde{\varrho} - \tilde{\bar{\varrho}} + 4\tilde{\varepsilon})\tilde{\sigma} - \tilde{\delta}\tilde{z} + (2\tilde{\tau} + \tilde{\bar{\alpha}} + 3\tilde{\beta})\tilde{\alpha}. \quad (6.14)$$

Alkalmazzuk az (5.15), (6.9) felbontást az  $SL(2, C)$  spin koefficiensekre és a tildézett operátorokra:

$$\begin{aligned} \Psi_0 = D\sigma - (\varrho + G_0 + \bar{\varrho} + \bar{G}_0 + 2\varepsilon + G_0 - \bar{G}_0)\sigma - \sqrt{f}\delta \frac{\kappa - 2G_+}{\sqrt{f}} - \\ - \left( \kappa + \bar{\tau} + \frac{5G_+ + \bar{G}_+}{2} \right) (\kappa - 2G_+). \end{aligned} \quad (6.15)$$

A spin koefficiensek deriváltjait (6.11a) azonosság segítségével kiküszöböljük. Hasonló módon, (I. 5.33c, f, i és j) azonosságokból kapjuk a fennmaradó  $\Psi_A$  skalárokat. Végeredmények:

$$\Psi_0 \equiv -\tilde{R}_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{l}^\alpha \tilde{m}^\beta \tilde{l}^\gamma \tilde{m}^\delta = 2[\delta G_+ - \sigma G_0 + \bar{\tau} G_+ + (2G_+ + \bar{G}_+)G_+] \quad (6.16a)$$

$$\Psi_1 \equiv -\tilde{R}_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{l}^\alpha \tilde{n}^\beta \tilde{l}^\gamma \tilde{m}^\delta = -\sqrt{f}[DG_+ - \kappa G_0 - \varepsilon G_+ + (2G_0 + \bar{G}_0)G_+] \quad (6.16b)$$

$$\begin{aligned} \Psi_2 \equiv -\frac{1}{2} \tilde{R}_{\alpha\beta\gamma\delta} (\tilde{l}^\alpha \tilde{n}^\beta \tilde{l}^\gamma \tilde{n}^\delta - \tilde{l}^\alpha \tilde{n}^\beta \tilde{m}^\gamma \tilde{m}^\delta) = \\ = \frac{f}{2} [DG_0 + \bar{\kappa} G_+ + \kappa G_- + (G_0 + \bar{G}_0)G_0 - 2G_+ G_-] \end{aligned} \quad (6.16c)$$

$$\Psi_3 \equiv \tilde{R}_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{l}^\alpha \tilde{n}^\beta \tilde{n}^\gamma \tilde{m}^\delta = \frac{f^{3/2}}{2} [DG_- - \bar{\kappa} G_0 + \varepsilon G_- + (2G_0 + \bar{G}_0)G_-] \quad (6.16d)$$

$$\Psi_4 \equiv -\tilde{R}_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{n}^\alpha \tilde{m}^\beta \tilde{n}^\gamma \tilde{m}^\delta = \frac{f^2}{2} [\delta G_- - \bar{\sigma} G_0 + \tau G_- + (2G_- + \bar{G}_-)G_-]. \quad (6.16e)$$



### 7. Sajátságár

Legyen a négydimenziós világban  $\tilde{l}^\mu$  fényszerű geodetikus görbesereg érintő vektora:

$$\tilde{l}_\mu \tilde{l}^\mu = 0 \quad (7.1)$$

és affin paraméterezés esetén

$$\tilde{l}_{\mu;v} \tilde{l}^v = 0. \quad (7.2)$$

Abból a célból, hogy a Christoffel-szimbólumokat kiküszöböljük (7.2)-ből, levonjuk belőle (7.1) kovariáns deriváltját:

$$(\tilde{l}_{\mu;v} - \tilde{l}_{v;\mu}) \tilde{l}^v = 0. \quad (7.3)$$

A kovariáns deriválás szabályai értelmében (7.3) így írható fel parciális deriváltakkal:

$$(\tilde{l}_{\mu;v} - \tilde{l}_{v;\mu}) \tilde{l}^v = 0. \quad (7.4)$$

Stacionárius problémát vizsgálunk,  $\xi_\mu$  időszerű Killing-vektor:  $\xi_{(\mu;\nu)} = 0$ . Az  $\tilde{l}_\mu \xi^\mu$  skalárszorzat geodetikus vonalak mentén megőrződik:

$$(\tilde{l}_\mu \xi^\mu)_{;v} \tilde{l}^v = \tilde{l}_{\mu;v} \xi^\mu \tilde{l}^v + \tilde{l}_\mu \xi^\mu_{;v} \tilde{l}^v = 0. \quad (7.5)$$

Az első tag (7.2) szerint, a második tag  $\xi_{\mu;v}$  antiszimmetriája miatt eltűnik.

(7.5) összefüggés mutatja, hogy található olyan fényszerű görbesereg, amelynek  $\tilde{l}^\mu$  érintő vektorára mindenütt igaz:

$$\tilde{l}^\mu \xi_\mu = 1. \quad (7.6)$$

A (7.6)-nak eleget tevő  $\tilde{l}^\mu$  vektor kontravariáns komponenseire érvényes (5.6a) felbontás:

$$\tilde{l}^\mu = (l^i, f^{-1} - l_j \omega^j), \quad (7.7)$$

ahol  $l^i$  egységvektor  $V_3$  térben:  $l^i l^j g_{ij} = 1$  (7.7)-ből kapjuk a kovariáns  $\tilde{l}_\mu$  komponensek felbontását:

$$\tilde{l}_\mu = (-f^{-1} l_i + \omega_i, 1). \quad (7.8)$$

(7.4)-be helyettesítve azt találjuk, hogy az egyenlet  $\mu=0$ -ra azonosan teljesül. A tér-szerű komponensekből:

$$f \tilde{l}_{i|j} l^j - f_{,i} - (f_{,j} l^j) l_i + \varepsilon_{ijk} \varphi^j l^k \sqrt{g} = 0. \quad (7.9)$$

Itt felhasználtuk az  $l_i l^i = 1$  feltételből származó  $l_{i,j} l^i = 0$  összefüggést.

Ha  $l^i$  vektorra teljesül az

$$f_{,i} - (f_{,j} l^j) l_i + \varepsilon_{ijk} \varphi^j l^k \sqrt{g} = 0 \quad (7.10)$$

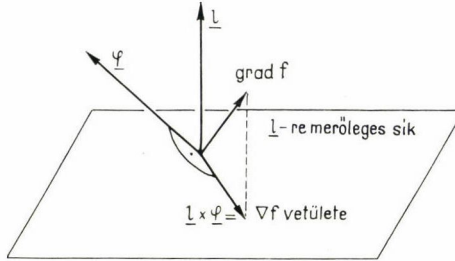
algebrai egyenlet, akkor (7.9)-ből:

$$l_{i|j} l^j = 0, \quad (7.11)$$

vagyis  $l^i$  geodetikus vonalak érintő vektora  $V_3$  térben. (7.10) két független feltételt ad  $l^i$  vektorra, mivel az egyenlet bal oldalának  $l^i$  vetülete azonosan eltűnik. Ezért, ha  $f_{,i}$  és  $\varphi^i$  vektorok adottak, akkor (7.10) meghatározza  $l^i$  egységvektor irányát.

A (7.10) egyenlettel rögzített  $l^i$  vektor  $V_3$  tér egy görbeseregének érintője. Ezt a görbesereget a gravitációs tér sajátugarainak nevezzük.\*

Sztatikus esetben ( $\varphi_i=0$ ) (7.10) egyenlet jelentése az, hogy  $l^i$  vektor az  $f=\text{konst.}$  feltétellel megadott felületek normális egységvektora. Általános stacionárius térre (7.10) geometriai jelentése bonyolultabb, és a 7.1 ábrán látható módon ábrázolható.



7.1. ábra: A sajátugarak érintő vektora

Bevezetjük **A** és **B** vektorok kovariáns vektori szorzatát:

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{ijk} A^j B^k \sqrt{g}. \quad (7.12)$$

(7.10) értelmében  $\nabla f$  vektor vetülete a sajátugarra merőleges síkra egyenlő  $\mathbf{l}$  és  $\varphi$  vektori szorzatával,

$$\text{proj}_l \nabla f = \mathbf{l} \times \varphi. \quad (7.13)$$

E feltétel rendkívül egyszerű alakú triádkomponensekre. Felhasználjuk, hogy a bázisvektorokra teljesülnek az

$$\varepsilon_{ijk} l^j m^k \sqrt{g} = i m_i \quad (7.14)$$

$$\varepsilon_{ijk} m^j \bar{m}^k \sqrt{g} = i l_i$$

összefüggések.  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségek (4.10) kommutátora és a bázis (5.1) definíciója segítségével igazolhatjuk (7.14) formulákat. Mint már említettük, (7.10) feltétel  $l^i$  vetülete azonosan teljesül.  $m^i$  bázisvektorral skalárisan szorozva és (7.14)-et figyelembe véve,  $\mathcal{E}_+ = 0$  adódik. Az  $\bar{m}^i$  vetülethől az  $\bar{\mathcal{E}}_- = 0$  egyenletet kapjuk, amely  $\mathcal{E}_+ = 0$

komplex konjugáltja. **G** vektor  $G_+ = \frac{\mathcal{E}_+}{2 \text{Re } \mathcal{E}}$  triádkomponensével:

$$G_+ = 0. \quad (7.15)$$

Megkaptuk (7.10) triádalakját. Innen leolvasható, hogy  $l^i$  bázisvektort a sajátugarak érintő vektorának választva a fennmaradó megengedett triádforgatások:

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} e^{iC}, \quad \mathbf{l}' = \mathbf{l}, \quad (7.16)$$

ahol  $C$  tetszőleges valós függvény.

\* Az elnevezésnek nincs kapcsolata a matematika sajátérték, sajátvektor stb. kifejezéseivel. Mint  $V_3$  tér bármely vektora, a sajátugarak érintője is megadható  $P_i^j$  tenzor sajátvektorainak (3. fejezet) lineárkombinációjaként. A kapcsolat azonban nem szembeszökően egyszerű.



A stacionárius gravitációs terek 3. fejezetben bemutatott invariáns osztályozása finomítható a sajátságok geometriai tulajdonságainak figyelembevételével.  $l^i$  vektor ezután is a sajátságok érintő vektora, vagyis teljesül (7.15). Az  $SU(2)$  spin koefficiensek geometriai jelentése alapján (5. fejezet),  $\kappa=0$ -ra a sajátságok geodetikus vonalai  $V_3$  térnek. Ha geodetikus sajátságokra  $\text{Re } \varrho$ ,  $\text{Im } \varrho$  vagy  $\sigma$  eltűnik, akkor ennek megfelelően zérus a sajátságok divergenciája, rotációja, illetőleg nyírása (l. (5.15) egyenleteket).

A sajátságok fogalmának jelentőségét az adja meg, hogy a fizikai modellekben használható egzakt stacionárius megoldások a geodetikus sajátságokat tartalmazó típusokhoz tartoznak. 8. fejezetben megmutatjuk, hogy a Kerr-megoldás nyírásmentes, geodetikus sajátságokat tartalmazó tér. A sajátságok fogalmának bevezetése előtt a Kerr-megoldást a háromdimenziós invariáns osztályozásban a  $G$  (algebraikailag általános) típusúhoz soroltuk (3. fejezet), és nem látszott olyan ésszerű feltétel, amellyel a stacionárius Einstein-egyenletekből a Kerr-megoldás származtatható lenne [27]. 8. fejezetben kitűnik majd, hogy a Kerr-megoldáshoz vezető alkalmas feltevés éppen a sajátságok nyírásmentessége és geodetikussága.

(7.10) feltétel  $V_3$  térben fejez ki geometriai viszonyokat.  $V_3$  teret  $\xi^\mu$  időszerű Killing-vektor rögzíti. Ebben az értelemben a sajátságok  $\xi^\mu$  vektorteret jellemzik.  $\tilde{R}_{\lambda\mu\nu\varrho}$  négydimenziós görbületi tenzor null főirányai másik görbesereget határoznak meg: a *sugarakat* (l. 3. fejezet). Felvetődik a kérdés: van-e valamiféle kapcsolat a kétféleképpen kapott görbék között?

(7.9) egyenletből látszik, hogy  $l^i$  (7.10) választása esetén  $\tilde{l}^\mu$  általában nem geodetikus vonalak érintő vektora  $V_4$ -ben, de ha igen, akkor a sajátságok  $V_3$  geodetikus vonalai. Ha üres terekre szorítkozunk ( $\tilde{R}_{\mu\nu}=0$ ), a Goldberg—Sachs tételből (l. 5. fejezet) következik, hogy a nyírásmentes geodetikus sajátságokkal rendelkező terek algebraikailag speciálisak. Ez az eredmény a görbületi tenzor (6.16) alakjából is megkapható.  $G_+ = 0$  választással

$$\begin{aligned}\Psi_0 &= -2\sigma G_0 \\ \Psi_1 &= \sqrt{f} \kappa G_0.\end{aligned}\tag{7.17}$$

Ha  $\sigma=0$ , akkor az l. 5. fejezetben mondottak értelmében  $\tilde{l}^\mu$  vektor null főirányban helyezkedik el. Ezért  $\sigma=0$  esetben a sajátságok egybeesnek  $V_3$  térben a sugarak vetületével. A nyírásmentes sugarakat tartalmazó gravitációs terek osztálya azonos a nyírásmentes sajátságokkal rendelkező terek osztályával.

Nyírásmentes geodetikus sajátságokra ( $\sigma=\kappa=0$ ) (7.17) szerint  $\Psi_0=\Psi_1=0$ , vagyis az algebraikailag speciális terekre jellemző (l. 5.43) feltételt kapjuk.

A geodetikus sajátságokat tartalmazó terek a gravitációs egyenletek egzaktul megoldhatók. A stacionárius téregyenleteknek ez a tulajdonsága a Newman—Penrose formalizmusban a geodetikus sugarakra való megoldhatóságra emlékeztet (l. 5. fejezet). A megoldás módját 8. fejezetben mutatjuk be nyírásmentes geodetikus sajátságokra. A mondottak értelmében a gravitációs tereknek ez az osztálya azonos a Newman—Penrose egyenletekkel is jól kezelhető geodetikus sugarakat tartalmazó stacionárius terek osztályával, így azt várjuk, hogy eljárásunk a nyírásmentes esetben visszaadja az irodalomból jól ismert eredményeket. 8. fejezetben valóban arra az eredményre jutottunk, hogy a kapott megoldások aszimptotikus símaság feltételezésével azonosak a Kerr-megoldásokkal.



Új eredményeket várunk a módszertől a  $\sigma \neq 0$ ,  $\kappa = G_+ = 0$  feltételekkel jellemzett terekre, mivel (7.17) alapján beláttuk, hogy ebben az esetben a sajátságok nem párhuzamosak a null főirányokkal. A gravitációs egyenletek ezen megoldásainak levezetése a korábbi módszerekkel nem volt lehetséges. 9. fejezetben közöljük egy tétel bizonyítását, amelynek értelmében a nyíró geodetikus sugarakat tartalmazó terek osztálya rendkívül „szűk”; az ide tartozó metrikák pedig a patológikus aszimptotikus viselkedést mutató cilindrikus terek (I. 5. fejezet) közé sorolhatók.\* A tételt *Kóta József* és a szerző [25] mondták ki. Az *Unti–Torrence* tétellel (I. 5. fejezet) összehasonlítva látszik, hogy a nyírásmentesség követelményének elhagyása mind a sugarak, mind a sajátságok esetében meglepő eredményeket szolgáltat: a várakozás az, hogy a  $\sigma \neq 0$ -ra a Kerr-megoldás általánosítását kapjuk. E tételek azonban a Kerr-határesetet kizárják: a térszerkezet a  $\sigma \rightarrow 0$  határátmenetben ugrásszerűen megváltozik.

A 10. fejezetben megadjuk a geodetikus sajátságokkal rendelkező összes forrásmentes stacionárius ívelemeket  $\sigma \neq 0$ -ra. Az általános megoldás három ívelem, amelyek közül az egyik a Papapetrou-terek speciális esetét írja le. A fennmaradó két ívelem az Einstein-egyenletek új egzakt megoldása.

## 8. A Kerr-metrika levezetése. A téregyenletek integrálása

Nyírásmentes geodetikus sajátságokkal rendelkező üres tereket vizsgálunk:

$$\sigma = \kappa = G_+ = \varphi_{mn} = \chi_m = \lambda = 0. \quad (8.1)$$

A koordinátarendszert úgy választjuk meg, hogy  $x^1$  koordináta legyen a sajátságok  $r$  affin paramétere,  $x^a$  ( $a=2,3$ ) koordináták pedig a sajátságokat számozzák. Ebben a koordinátarendszerben a bázisvektorok komponensei így írhatók fel:

$$\begin{aligned} l^i &= \delta_1^i, \\ m^i &= \omega \delta_1^i + \xi^a \delta_a^i, \quad a = 2, 3. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Itt  $\omega$  és  $\xi^a$  a koordináták komplex függvényei és  $a$  indexre érvényes az Einstein-féle szummázási konvenció. A koordinátákat ezzel az

$$r' = r + r^0(x^a) \quad (8.3a)$$

$$x^{a'} = x^a(x^b) \quad (8.3b)$$

transzformációk erejéig rögzítettük le. (8.3a)  $r$  affin paraméter origópontját helyezi át az egyes sajátságok, (8.3b) pedig a sajátságok átszámolásával egyenértékű. Itt *Newman* és *Penrose* konvencióját követtük, amelynek értelmében a zérus felső indexszel ellátott mennyiségek nem függnak az affin paramétertől.

(8.2)-ből kapjuk a (6.8) skalár operátorok alábbi ábrázolását:

$$D = \partial/\partial r, \quad \delta = \omega \partial/\partial r + \xi^a \partial/\partial x^a. \quad (8.4)$$

\* Pontos definíciók hiányában legyen szabad a tétel tartalmát ebben a formában előrebocsátani. Az egzakt megfogalmazást 9. fejezetben adjuk meg.

A bázisvektorok választásában rendelkezésünkre álló (7.16) önkényt felhasználjuk  $\varepsilon = m_{ij} \bar{m}^i l^j$  mennyiség eltüntetésére. A triád helyzetét az

$$\varepsilon = 0 \quad (8.5)$$

kikötés az

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} e^{iC^0} \quad (8.6)$$

megengedett transzformációktól eltekintve lerögzíti. (8.6)-ban  $C^0$  valós függvénye  $x^a$  koordinátáknak.

A metrikus tenzor és spin koefficiensek között kapcsolatot teremtünk azzal, hogy (6.12) kommutátorokat  $r$  és  $x^a$  invariánsokra alkalmazzuk:

$$D\omega = \bar{\varrho}\omega \quad (8.7a)$$

$$D\xi^a = \bar{\varrho}\xi^a \quad (8.7b)$$

$$\delta\bar{\omega} - \bar{\delta}\omega = \bar{\tau}\bar{\omega} - \tau\omega + \bar{\varrho} - \varrho \quad (8.7c)$$

$$\delta\bar{\xi}^a - \bar{\delta}\xi^a = \bar{\tau}\bar{\xi}^a - \tau\xi^a. \quad (8.7d)$$

A téregyenletek másik csoportját (6.10) és (6.11) szolgáltatják:

$$D\varrho = \varrho^2 + G_0 \bar{G}_0 \quad (8.8a)$$

$$DG_0 = 2\varrho G_0 + (G_0 - \bar{G}_0)G_0 \quad (8.8b)$$

$$D\tau = \varrho\tau + \bar{G}_0 G_- \quad (8.8c)$$

$$\delta\varrho = \bar{G}_+ G_0 \quad (8.8d)$$

$$\delta\tau + \bar{\delta}\bar{\tau} = \varrho\bar{\varrho} + 2\tau\bar{\tau} - G_0 \bar{G}_0 + G_- \bar{G}_+ \quad (8.8e)$$

(6.10b—d) azonosságok nem nyújtanak új információt, mivel következnek (8.7)-ből.

(8.7) és (8.8) a nyírásmentes geodetikus sajátugarakat tartalmazó forrásmentes stacionárius terek egyenletei — egzaktul megoldhatók. Az egyenletek két típusba sorolhatók annak megfelelően, hogy a  $\delta$ , illetve  $\bar{\delta}$  operátorokat tartalmazzák-e vagy nem. Azokat az egyenleteket, amelyekben csak  $D$  operátor fordul elő, *radiális egyenleteknek* nevezzük. Mint a Newman—Penrose egyenletek esetében, először a radiális egyenleteket oldjuk meg. Ennek eredményeként megkapjuk a térmennyiségek  $r$  függését. Az integrálás során olyan integrációs „konstansok” jelennek meg, amelyek  $r$ -től nem függenek, de  $x^a$  koordinátáktól még függhetnek. E „konstansok” pontos alakját a nemradiális egyenletekből határozzuk meg. A térmennyiségek  $r$  függését a nemradiális egyenletekbe helyettesítjük. A lineárisan független  $r$  függvények együtthatójának külön-külön el kell tűnnie. Az ebből származó egyenletek adják meg az integrációs „konstansok” szögfüggését (vagyis  $x^a$  függését). Ez az egyenletek integrálásának programja. Most bemutatjuk a számolás részleteit.

Először a (8.8a) és (8.8b) csatolt egyenletekből álló rendszert oldjuk meg. Az egyenleteket összegezzük:

$$D(\varrho + G_0) = (\varrho + G_0)^2. \quad (8.9)$$

(8.9) megoldásai:

$$\varrho + G_0 = 0 \quad (8.10)$$

és

$$\varrho + G_0 = -\frac{1}{r - i\alpha}. \quad (8.11)$$

$\alpha$  integrációs „konstans”, amely csak  $x^a$  koordinátáktól függ, és (8.3a) felhasználásával elérhető, hogy valós legyen.

Most  $D$  operátorral (8.8b)-re hatunk és felhasználjuk (8.8a) egyenletet, valamint a  $G_0 = \frac{D\mathcal{E}}{2 \operatorname{Re} \mathcal{E}}$  összefüggést:

$$[D - 3(\varrho + G_0)]DD\mathcal{E} = 0. \quad (8.12)$$

$\varrho + G_0$  ismeretében (8.12) kiintegrálható. Az így kapott  $\mathcal{E}$  függvény még nem feltétlenül megoldása (8.8a, b) egyenleteknek, mivel (8.12) differenciálás útján keletkezik ezekből. (8.12) megoldásai tehát visszahelyettesítendőek (8.8a és b) egyenletekbe.

Megköveteljük, hogy a téregyenletek megoldása  $r \rightarrow \infty$  határesetben a Minkowski-metrikába menjen át:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \mathcal{E} = 1. \quad (8.13)$$

E határfeltétel a (8.10)-ből kapott megoldásokat kizárja. (8.11)-ből:

$$\mathcal{E} = 1 - \frac{2m}{r - i\alpha} \quad (8.14)$$

$$G_0 = \frac{m}{R^2} \frac{r + i\alpha}{r - i\alpha} \quad (8.15)$$

$$\varrho = -\frac{r - m + i\alpha}{R^2}, \quad (8.16)$$

ahol  $m$  az  $x^a$  koordináták egyelőre ismeretlen alakú valós függvénye és

$$R^2 \stackrel{\text{def}}{=} r^2 - 2mr + \alpha^2. \quad (8.17)$$

A fennmaradó radiális egyenletek a szokásos integrálási eljárásokkal könnyen megoldhatók, és az alábbi kifejezéseket kapjuk belőlük  $\omega$ ,  $\xi^a$  és  $\tau$  térmennyiségek  $r$  függésére:

$$\frac{\omega}{\omega^0} = \frac{\xi^a}{\xi^{a0}} = \frac{1}{R} e^{i\Omega} \quad (8.18)$$

$$\tau = \left[ \frac{m^2 \bar{\omega}^0}{\beta^2} \left( \frac{r - m}{R^2} + \frac{1}{2i\beta} \ln \frac{r - m - i\beta}{r - m + i\beta} \right) + \tau^0 \right] \frac{1}{R} e^{-\Omega}, \quad (8.19)$$

ahol  $\beta \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{x^2 - m^2}$  és  $e^{i\Omega}$  fázisfaktor részletes alakja:

$$e^{i\Omega} = \left( \frac{r - m - i\beta}{r - m + i\beta} \right)^{\frac{\alpha}{2\beta}}. \quad (8.20)$$



A sajátságok átszámolásával ((8.3b) transzformáció) elérhetjük, hogy

$$\xi^{20} = P, \quad \xi^{30} = iP \quad (8.21)$$

teljesüljön [35], (8.6) forgatással pedig  $P$  valóssá tehető. Ezzel  $\mathbf{m}$  bázisvektort teljesen lerögzítettük és (8.3) koordinátaszabadságból

$$z' = z'(z) \quad (8.22)$$

maradt, ahol  $z \stackrel{\text{def}}{=} x^2 + ix^3$  és  $z'$  tetszőleges analitikus függvénye  $z$ -nek [35].

A nemradiális egyenletek megoldását célszerű a  $G_+ = 0$  feltétellel ekvivalens

$$\delta \mathcal{E} = 0 \quad (8.23)$$

egyenletbe helyettesítéssel kezdeni.  $\delta$  operátor (8.4) alakját felhasználva:

$$\frac{1}{R} e^{i\Omega} \left( \omega^0 \frac{\partial}{\partial r} + \delta \right) \left( 1 - \frac{2m}{r - i\alpha} \right). \quad (8.24)$$

Itt Newman és Penrose [34] nyomán bevezettük az  $\delta$  „edth” operátort

$$\delta \stackrel{\text{def}}{=} \xi^{0a} \partial_a \equiv 2P \frac{\partial}{\partial \bar{z}}. \quad (8.25)$$

$r$  szerint elvégezzük a deriválást és elhagyjuk a triviális  $\frac{1}{R} e^{i\Omega}$  faktort:

$$(r - i\alpha)^{-2} 2m(\omega^0 - i\delta\alpha) - (r - i\alpha)^{-1} 2\delta m = 0. \quad (8.26)$$

Itt  $m$  nem tűnhetik el azonosan, mert (8.14) szerint az  $m=0$  eset a görbüetlen Minkowski-térre jellemző  $\mathcal{E}=1$  értéket adja. Következésképpen (8.26) teljesül minden  $r$  értékre, ha

$$\omega^0 = i\delta\alpha \quad (8.27a)$$

és

$$\delta m = 0.$$

Az  $\delta m=0$  egyenletből következik, hogy a *valós*  $m$  mennyiség konstans.

A többi nemradiális egyenletek megoldása a bemutatott példához hasonlóan történik. Eredmények:

$$(8.7d) \rightarrow \tau^0 = \bar{\delta} \ln P \quad (8.27b)$$

$$(8.7c) \rightarrow \text{Im}(\bar{\delta}\omega^0 - \tau^0\omega^0 + i\alpha) = 0 \quad (8.27c)$$

$$(8.8e) \rightarrow \text{Re}(\bar{\delta}\omega^0 - \tau^0\omega^0) = 0 \quad (8.27d)$$

és

$$(8.8) \rightarrow \delta\tau^0 + \bar{\delta}\bar{\tau}^0 = 1 + 2\tau^0\bar{\tau}^0 \quad (8.27e)$$

(8.8d) egyenlet azonosan teljesül.

(8.27b és e) az alábbi egyenletet adják  $P$ -re:

$$(\delta\bar{\delta} + \bar{\delta}\delta) \ln P = 1 + 2\bar{\delta} \ln P \delta \ln P. \quad (8.28)$$

(8.27e, c és d) egyenletekből:

$$P\bar{\partial}(P^{-1}\delta\alpha) = -\alpha, \quad (8.29)$$

Megjegyezzük, hogy (8.29) egyenlet meglepő módon az impulzusmomentum kvantumelméletében is szerepel. Az impulzusmomentum-operátor sajátértékegyenlete  $l=1$ -re *edth* operátorral felírva éppen (8.29).

Alkalmas koordinátarendszerben, (8.22) transzformációk felhasználásával [49] (8.28) és (8.29) egyenletek általános megoldása így írható fel:

$$P = \frac{1+z\bar{z}}{2\sqrt{2}}, \quad \alpha = a \frac{1-z\bar{z}}{1+z\bar{z}}, \quad (8.30)$$

ahol  $a$  tetszőleges valós konstans.  $\omega^0$  és  $\tau^0$  meghatározható (8.27a és b)-ből:

$$\omega^0 = -\frac{\sqrt{2}az}{1+z\bar{z}}, \quad \tau^0 = \frac{\bar{z}}{\sqrt{2}} \quad (8.31)$$

Ezzel a téregyenleteket megoldottuk.  $V_3$  tér metrikus tenzorát (5.5) egyenletből számoljuk ki. A  $\vartheta$ ,  $\varphi$  valós koordinátákra áttérve a

$$z = e^{i\varphi} \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} \quad (8.32)$$

transzformációval, megkapjuk a Kerr-térre jellemző, (3.17)-ben szereplő  $g_{ij}$  tenzort.  $\omega_i$  (1.5)-ből határozható meg egy gradiens tagtól eltekintve. Az  $\omega_i$ -ben jelentkező önkény  $t$  időkoordináta megválasztásának határozatlanságából származik: az (1.8a) alakú időskálatranszformációk még megengedettek.

A (2.1) teljes négydimenziós ívelemben szereplő valamennyi függvényt meghatároztuk. (1.8a) felhasználásával az ívelem átranszformálható a Kerr-tér (3.14) ívelemébe.

### 9. Geodetikus sajátsugarakkal rendelkező terek\*

A téregyenleteket (6.10), (6.11) és (6.12) összefüggésekből kapjuk az alábbi feltevésekkel:

$$\kappa = \varepsilon = G_+ = 0 \quad (\text{a sajátsugarak geodetikusak}) \quad (9.1)$$

$$\varphi_{mn} = \chi_m = \lambda = 0 \quad (\text{forrásmentes tér}).$$

A radiális egyenletek:

$$D\sigma = (\varrho + \bar{\varrho})\sigma \quad (9.2a)$$

$$D\varrho = \varrho^2 + \sigma\bar{\sigma} + G_0\bar{G}_0 \quad (9.2b)$$

$$DG_0 = (2\varrho + G_0 - \bar{G}_0)G_0 \quad (9.2c)$$

$$D\tau = \varrho\tau + \bar{\sigma}\bar{\tau} + \bar{G}_0G_- \quad (9.2d)$$

\* 9. és 10. fejezetek Kóta József és a szerző [25] dolgozatának eredményeit ismertetik.

Nemradiális egyenletek:

$$\delta\varrho - \bar{\delta}\sigma = -2\sigma\tau + \bar{G}_+ G_0 \quad (9.3a)$$

$$\delta\tau + \bar{\delta}\bar{\tau} = \varrho\bar{\varrho} - \sigma\bar{\sigma} + 2\tau\bar{\tau} - G_0\bar{G}_0 - G_- \bar{G}_+ \quad (9.3b)$$

$$DG_- - \bar{\delta}G_0 = \varrho G_- - \bar{G}_0 G_- \quad (9.3c)$$

$$-\delta G_0 = \sigma G_- + G_0 \bar{G}_+ \quad (9.3d)$$

$$-\delta G_- = (\varrho - \bar{\varrho})G_0 - \bar{\tau}G_- + \bar{G}_+ G_- . \quad (9.3e)$$

Megengedett triádtanszformációk:

$$m' = m e^{iC^0}, \quad I' = I, \quad (9.4)$$

ahol  $C^0$  valós és  $DC^0=0$ . (9.2)-ből  $D(\sigma/\bar{\sigma})=0$ , ezért (9.4) felhasználásával  $\sigma$  spin koefficiens valósnak és nemnegatívnak választjuk.

A következőkben a tárgyalás koordináta-invariáns lesz, ezért  $D$  és  $\delta$  operátorok részletes alakját nem használjuk, csupán kommutátoraikat:

$$D\delta - \delta D = \bar{\varrho}\delta - \sigma\bar{\delta} \quad (9.5a)$$

$$\delta\bar{\delta} - \bar{\delta}\delta = \bar{\tau}\bar{\delta} - \tau\delta + (\bar{\varrho} - \varrho)D. \quad (9.5b)$$

A levezetésekben  $\delta$  operátor helyett gyakran célszerűbb a

$$\delta_{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} R(\delta \pm i\bar{\delta}) \quad (9.6)$$

operátorokat használni. Itt  $R$  a „luminozitási távolság” [33], amely eleget tesz a  $DR = -\frac{\varrho + \bar{\varrho}}{2} R$  egyenletnek. Definíció szerint  $D$  és  $\delta_{\pm}$  operátorok a következőképpen kommutálnak:

$$D\delta_{\pm} - \delta_{\pm} D = -i(a \mp \sigma)\delta_{\mp}, \quad (9.7)$$

ahol

$$a \stackrel{\text{def}}{=} \text{Im } \varrho. \quad (9.8)$$

Ezen eszközök birtokában bebizonyítjuk az alábbi tételt:

*Geodetikus sajátságok görbült, stacionárius, forrásmentes gravitációs térben nem rendelkezhetnek egyidejűleg nyírással és rotációval. Ha a sajátságok nyírnak ( $\sigma \neq 0$ ), akkor divergálnak is ( $\varrho + \bar{\varrho} \neq 0$ ) és teljesülnek a következő összefüggések:*

$$\delta\varrho = \delta\sigma = \delta|G_0| = 0, \quad (9.9)$$

továbbá

$$\varrho\bar{\varrho} - \sigma\bar{\sigma} - G_0\bar{G}_0 = 0. \quad (9.10)$$

A négydimenziós formalizmus mintájára (I. 5. fejezet) a (9.10) összefüggésnek eleget tevő sajátságokat *cilindrikusnak* mondjuk.

A tétel bizonyítására azt az eljárást követjük, amelynek segítségével Newman és Penrose [33] a négydimenziós formalizmusban a Goldberg—Sachs tételt (I. I. 5. fejezet) bizonyítják be: (9.2) és (9.3) téregyenletekre alkalmasan választott skalár operátorokkal hatunk és a második deriváltakat kiküszöböljük a kommutátorok



segítségével. Ily módon ismét elsőrendű egyenletekre jutunk. Az eljárás többszöri végrehajtása útján kapjuk a tételben foglalt állításokat.

A következőkben feltesszük, hogy  $\sigma$  nem tűnik el azonosan. Megjegyzendő, hogy a tétel megfogalmazása kizárja a  $G_0=0$  esetet is, ugyanis  $G_0=0$ -ra (9.3d)-ből  $G_-=0$  következik. A  $G_0=G_-=0$  feltétel pedig könnyen belátható módon csak a vizsgáldásainkból kizárt görbületlen (Minkowski) térre teljesül.

Az egyetlen olyan egyenletpár, amelyből a fentebb vázolt eljárással új elsőrendű összefüggéshez jutunk, (9.2c) és (9.3d). Mivel  $G_0 \neq 0$ , írhatjuk:

$$D \ln G_0 = 2\varrho + G_0 - \bar{G}_0 \quad (9.11a)$$

$$-\delta \ln G_0 = \bar{G}_+ + \sigma \frac{G_-}{G_0}. \quad (9.11b)$$

(9.11a)-ra  $\delta$  operátorral, (9.11b)-re  $D$  operátorral hatunk, a kapott egyenleteket összeadjuk és a vegyes deriváltakat (9.5a) segítségével elimináljuk. Az eredményt a téregyenletek segítségével tovább egyszerűsítve az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\sigma(\bar{\delta} \ln G_0 + \bar{\delta} \ln \sigma - G_- - 2\tau) = 0. \quad (9.12)$$

Megjegyezzük, hogy a tárgyalásból kizárt  $\sigma=0$  esetben (9.12) azonosságba megy át; a nyírásmentes esetben (9.2), (9.3) téregyenletek teljes rendszert alkotnak.

(9.12)-re  $D$  operátorral hatva és a megfelelő radiális egyenletek  $\delta$  deriváltjait kivonva oly módon, hogy a másodrendű tagokat ismét kiküszöböljük:

$$3\gamma^2 \bar{\delta} \varrho + (\gamma^2 + \sigma^2) \delta \sigma + (\gamma^2 - \sigma^2) (\bar{\delta} \bar{\varrho} + 2\bar{\sigma} \bar{\tau}) = 0, \quad \gamma \stackrel{\text{def}}{=} |G_0|. \quad (9.13)$$

Innen homogén egyenletet kapunk (9.3a) behelyettesítésével:

$$\gamma(3\bar{\delta} \varrho + 2\delta \sigma + \bar{\delta} \bar{\varrho}) + 2\sigma \delta \gamma = 0. \quad (9.14)$$

$\delta_{\pm}$  operátorokkal felírva ez az egyenlet igen egyszerűen felbontható a komplex síkban egymásra kölcsönösen merőleges komponensekre:

$$\gamma \delta_{\pm} (\varrho + \bar{\varrho}) - i\gamma \delta_{\mp} a \pm i\delta_{\mp} (\sigma \gamma) = 0. \quad (9.15)$$

(9.7) kommutátorokból és a téregyenletekből:

$$[D - (\varrho + \bar{\varrho})] \delta_{\pm} (\varrho + \bar{\varrho}) = 4\Delta \delta_{\pm} \Delta - i(a \mp \sigma) \delta_{\mp} (\varrho + \bar{\varrho}) \quad (9.16)$$

ahol

$$[D - (\varrho + \bar{\varrho})] \delta_{\pm} \mathbf{v} = \mathbf{v} \delta_{\pm} (\varrho + \bar{\varrho}) - i(a \mp \sigma) \delta_{\mp} \mathbf{v},$$

$$\Delta \stackrel{\text{def}}{=} \sigma^2 + \gamma^2 - a^2 \quad \text{és} \quad \mathbf{v} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \Delta \\ a \\ \sigma \\ \gamma \end{pmatrix}. \quad (9.17)$$

$D-(\varrho+\bar{\varrho})$  operátort ismételten alkalmazva (9.15) egyenletre és felhasználva (9.16)-ot, homogén elsőrendű egyenletek alábbi sorozatát nyerjük:

$$(3a \pm 2\sigma)\delta_{\pm}(\varrho+\bar{\varrho}) + 4i\Delta\delta_{\mp}\Delta - 2i(a \mp \sigma)\delta_{\mp}a = 0 \quad (9.18a)$$

$$[(2a \pm 4\sigma)(a \mp \sigma) + 4\Delta^2]\delta_{\mp}(\varrho+\bar{\varrho}) + i(3a \pm 4\sigma)4\Delta\delta_{\pm}\Delta = 0 \quad (9.18b)$$

$$[a(a^2 - \sigma^2) - \Delta^2(5a \mp 4\sigma)]\delta_{\mp}(\varrho+\bar{\varrho}) + i[(2a \mp \sigma)(a \pm \sigma) - \Delta^2]4\Delta\delta_{\pm}\Delta = 0. \quad (9.18c)$$

(9.18b és c) homogén algebrai egyenletrendszer alkotnak  $\delta_{\pm}(\varrho+\bar{\varrho})$  és  $\delta_{\pm}\Delta$  mennyiségekre, a felső és alsó előjelekkel külön-külön. A megfelelő determinánsok:

$$D_u = 4\Delta^4 - \Delta^2(8\sigma^2 - 5a^2 \mp 2a\sigma) + (a^2 - \sigma^2)(a^2 - 4\sigma^2 \pm 2a\sigma). \quad (9.19)$$

Itt  $u$  és  $l$  a felső, illetőleg az alsó előjelekkel megadott egyenletek determinánsát indexeli.  $D_u$  és  $D_l$  egyidejű eltűnéséből a görbüetlen térre jellemző  $\gamma=0$  összefüggés adódik. Tekintsük most azt az esetet, ha

$$D_u = 0 \quad (9.20)$$

az alsó előjelekkel megadott egyenletek determinánsa azonban nem tűnik el, ezért

$$\delta_+(\varrho+\bar{\varrho}) = \delta_-\Delta = 0. \quad (9.21)$$

A fent bemutatott eljárással (9.21)-ből újabb elsőrendű összefüggéseket vezetünk le:

$$4\Delta\delta_+\Delta - i(a-\sigma)\delta_-(\varrho+\bar{\varrho}) = 0 \quad (9.22)$$

$$\Delta\delta(\varrho+\bar{\varrho}) - i(a+\sigma)\delta_+\Delta = 0.$$

Innen következik, hogy vagy

$$\delta_+\Delta = \delta_-(\varrho+\bar{\varrho}) = 0, \quad (9.23)$$

vagy (9.22) egyenletek determinánsa eltűnik:

$$\det \equiv 4\Delta^2 + a^2 - \sigma^2 = 0. \quad (9.24)$$

A determináns eltűnése (9.18)-ba helyettesítve ismét (9.23) feltételekhez vezet.  $D_u$  eltűnéséből tehát mindig következnek (9.21) és (9.23) összefüggések.

A  $D_u=0$  eset hasonló módon vizsgálható. Végeredményben azt kapjuk, hogy (9.18b és c) egyenletekből mindig következik:

$$\delta_+(\varrho+\bar{\varrho}) = \delta_-(\varrho+\bar{\varrho}) = \delta_+\Delta = \delta_-\Delta = 0. \quad (9.25)$$

Visszatérve  $\delta$  operátor használatára, (9.25) így írható:

$$\delta(\varrho+\bar{\varrho}) = \delta\Delta = 0. \quad (9.26)$$

Tegyük fel, hogy  $\varrho+\bar{\varrho}$  nem tűnik el azonosan. Ekkor (9.5b) kommutátorral  $\varrho+\bar{\varrho}$  és  $\Delta$  mennyiségekre hatva  $a=0$  adódik. Most belátjuk, hogy  $\varrho+\bar{\varrho}$  valóban nem tűnhet el.

(9.15), (9.18a) és (9.26) egyenletekből következik, hogy  $\delta\sigma=\delta\gamma=\delta a=0$ . Jelöljük  $G_0$  fázisát  $\chi$ -vel:  $G_0=\gamma e^{i\chi}$ .  $\chi$  valós függvény, amelynek segítségével (9.12) egyenletet a következőképpen írjuk fel:

$$i\delta\chi - G_- = 2\tau. \quad (9.27)$$

$\delta$  operátorral (9.27)-re hatunk, a kapott egyenlet valós részét vesszük és levonjuk (9.3b) téregyenletet:

$$(\varrho - \bar{\varrho})^2 + 2(\varrho\bar{\varrho} - \gamma^2 - \sigma^2) = 0. \quad (9.28)$$

(9.2b) téregyenletbe helyettesítve azt kapjuk, hogy  $\varrho + \bar{\varrho}$  nem tűnik el, és  $\varrho\bar{\varrho} - \gamma^2 - \sigma^2 = 0$ . Ezzel a bizonyítást végrehajtottuk.

### 10. Új megoldások $\sigma \neq 0$ -val\*

Ebben a fejezetben megadjuk a geodetikus sajátugarakat tartalmazó forrásmentes, stacionárius téregyenletek általános megoldását arra az esetre, ha a sajátugarak nyírása nem tűnik el:

$$G_+ = \varkappa = \varepsilon = \varphi_{mn} = \chi_m = \lambda = 0, \quad \sigma \neq 0. \quad (10.1)$$

A nyírásmentes esetben a sajátugarak párhuzamosak a null főirányokkal, ezért a  $\sigma=0$  feltétellel jellemzett terek az irodalomban korábban ismert módszerekkel is egzaktul tárgyalhatók (7. fejezet). A nyírásmentes esetnek az itt bevezetett módszerrel történő tárgyalását 8. fejezetben a Kerr-tér példáján demonstráltuk.

A koordinátarendszert a 8. fejezetben bemutatott módon választjuk meg. Ekkor  $D = \partial/\partial r$ ,  $\delta = \omega\partial/\partial r + \xi^a\partial/\partial x^a$  és (8.3) koordinátatranszformációk még megengedettek. A kommutátorokkal  $r$  és  $x^a$  invariánsokra hatunk, és az így kapott egyenletekkel kiegészítjük a téregyenletek (9.2), (9.3) rendszerét. (9.3c, d és e) elhagyhatók, mivel következnek a kommutátorokból. A radiális egyenletek a 8. fejezet számolásai mintájára kiintegrálhatók, és a térmennyiségek  $r$  függését szolgáltatják:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma}{\sigma^0} &= \frac{\gamma}{\gamma^0} = -\varrho = \frac{1}{2r} \\ G_0 &= -\frac{\gamma^0}{2r} \frac{r\gamma^0 - iQ}{r\gamma^0 + iQ}. \end{aligned} \quad (10.2)$$

$$\xi^a = \frac{1}{\sqrt{2r}} (A^a r^{\sigma^0/2} + iB^a r^{-\sigma^0/2}).$$

Itt  $Q$ ,  $A^a$  és  $B^a$  valós függvényei  $x^a$  koordinátáknak,  $\sigma^0$  és  $\gamma^0$  pozitív számok, melyekre

$$\sigma^{02} + \gamma^{02} = 1. \quad (10.3)$$

Felhasználtuk (8.3a) transzformációkat  $r$  koordináta rögzítésére. A  $\delta\varrho=0$  feltételből  $\omega=0$  adódik ebben a koordinátarendszerben.  $\mathcal{E} \equiv f + i\varphi$  skalár  $r$  függését  $G_0$  definíciójából kapjuk:

$$G_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{D\mathcal{E}}{2 \operatorname{Re} \mathcal{E}}. \quad (10.4)$$

\* Lásd a lábjegyzetet a 226. lapon.



$G_0$  (10.2)-ben feltüntetett  $r$  függésével

$$\mathcal{E} = \frac{f^0}{r^{\gamma^0} + iQ} + i\varphi^0, \quad (10.5)$$

ahol  $f^0$  és  $\varphi^0$  valós függvényei  $x^a$  koordinátáknak.

A radiális egyenletek megoldásainak birtokában fordítsuk figyelmünket a

$$\delta\mathcal{E} = 0 \quad (10.6a)$$

$$\text{Im}[(\delta - \bar{\tau})\bar{\xi}^a] = 0 \quad (10.6b)$$

$$2\sigma\tau = \bar{G}_+ G_0 \quad (10.6c)$$

$$\tau(\sigma^2 - \gamma^2) = 0 \quad (10.6d)$$

nemradiális egyenletek megoldására.

(10.6d)-ből következik, hogy a megoldásokra vagy  $\tau=0$  vagy  $\gamma=\sigma$  teljesül. A továbbiakban a megoldások e két osztályát különválasztva vizsgáljuk. Ennek során belátjuk majd, hogy a  $\tau=0$  feltételnek eleget tevő metrikák a Papapetrou-megoldások [38] speciális esetei. Új megoldások a  $\sigma=\gamma$  osztályban fordulnak elő.

### 10.1. Megoldások $\tau=0$ -val

(10.6c)-ből  $\bar{G}_+=0$  következik, ahonnan  $\delta\mathcal{E}=0$ .  $\mathcal{E}$  nem függ  $x^a$  koordinátáktól. Ez minden  $r$  értékre csak akkor teljesül, ha  $f^0$  és  $Q$  konstansok. Mivel  $f$  és  $\varphi$  most csak  $r$  koordinátától függenek, ezért itt a megoldások azon osztályának speciális esetét kaptuk, amelyre  $f$  és  $\varphi$  között funkcionális összefüggés áll fenn [38].

$\xi^a$  mennyiségek (10.2)  $r$  függését (10.6b)-ben felhasználva azt kapjuk, hogy  $A \stackrel{\text{def}}{=} A^a \partial_a$  és  $B \stackrel{\text{def}}{=} B^a \partial_a$  operátorok kommutálnak,

$$[A, B] = 0. \quad (10.1.1)$$

A megengedett koordinátatranszformációk  $V_3$  térben (8.3b) alakúak. Ezen transzformációkat tekintve  $A^a$  és  $B^a$  kétkomponensű vektorként viselkednek. Mivel reguláris pontokban  $A^a$  és  $B^a$  lineárisan függetlenek, (10.1.1) értelmében az  $x^2 \equiv x$  és  $x^3 \equiv y$  koordináták megválaszthatók úgy, hogy a koordinátavonalak érintő vektorai  $A^a$  és  $B^a$  legyenek:

$$A^a = \delta_2^a, \quad B^a = \delta_3^a. \quad (10.1.2)$$

A koordináták e választásával

$$\xi^2 = \frac{1}{\sqrt{2}r} e^{\sigma^0/2}, \quad \xi^3 = \frac{i}{\sqrt{2}r} e^{-\sigma^0/2}, \quad (10.1.3)$$

$V_3$  tér metrikus tenzorát a  $g^{ij} = l^i l^j + m^i \bar{m}^j + \bar{m}^i m^j$  összefüggésből kapjuk:

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & r^{\sigma^0-1} & \\ & & r^{-\sigma^0-1} \end{bmatrix}. \quad (10.1.4)$$

Most meghatározzuk a (2.2) teljes négydimenziós ívelemben szereplő  $\omega_i$  vektort. (2.5)-ből

$$\omega_{i,j} - \omega_{j,i} = \varepsilon_{ijk} \phi^k \sqrt{g} f^{-2}. \quad (10.1.5)$$

$t$  koordináta megválasztásában még rendelkezésünkre áll a koordinátavonalak kezdőpontjának eltolásából álló önkény:

$$t' = t + F(r, x^a). \quad (10.1.6)$$

Ennek segítségével elérhető  $\omega_r = 0$ , és még megengedettek a

$$t' = t + t^0(x, y) \quad (10.1.7)$$

alakú időskálázások. (10.1.5)-ből

$$\begin{aligned} \omega_{x,r} &= \omega_{y,r} = 0, \\ \omega_{x,y} - \omega_{y,x} &= \frac{2\gamma^0 Q}{f^0}. \end{aligned} \quad (10.1.8)$$

A megoldást (10.1.7) felhasználásával így írhatjuk fel:

$$\omega_i = \left( 0, 0, -\frac{2\gamma^0 Q}{f^0} x \right). \quad (10.1.9)$$

Ezzel a négydimenziós (2.1) ívelemben az összes függvényeket meghatároztuk, és az eredményt a következőképpen foglalhatjuk össze:

$$\begin{aligned} d\bar{s}^2 &= -\frac{r^{2\gamma^0} + Q^2}{f^0 r^{\gamma^0}} (dr^2 + r^{1-\sigma^0} dx^2 + r^{1+\sigma^0} dy^2) + \\ &+ \frac{f^0 r^{\gamma^0}}{r^{2\gamma^0} + Q^2} \left( dt - 2\gamma^0 \frac{x}{f^0} Q dy \right)^2. \end{aligned} \quad (10.1.10)$$

Az Einstein-egyenleteknek a fenti ívelemmel megadott megoldása stacionárius és tengelyszimmetrikus. E tér további jellemzője — mint korábban megjegyeztük — hogy  $f$  csak  $\phi$  skaláron keresztül függ a koordinátáktól. Ezért (10.1.10) ívelem a Papapetrou-megoldások [38] egy speciális esetét írja le.

## 10.2. Megoldások $\sigma = \gamma$ -val

A sima tér határesetét most a (10.3)-ból következő

$$\sigma^0 = \gamma^0 = 1/\sqrt{2} \quad (10.2.1)$$

értékek kizárják. (10.6) téregyenletek  $G_- = \bar{\delta} \ln f$  kiszámolása után megoldhatók. (10.6c) ekkor algebrai egyenlet  $\tau$ -ra. (10.6a és b)-ből

$$\delta \varepsilon = 0 \rightarrow \begin{cases} A\phi^0 = 0 & AQ = (B - QA) \ln f^0 \\ B\phi^0 = Af^0 & BQ = Q(B - QA) \ln f^0 \end{cases} \quad (10.2.2)$$

$$\text{Im}[(\delta - \bar{\tau})\bar{\xi}^a] = 0 \rightarrow 2[A, B] = 2Q(A \ln f^0)A - (A \ln f^0)B - (B \ln f^0)A. \quad (10.2.3)$$

új Némi egyszerűsödést eredményez, ha  $A$  és  $B$  operátorok helyett bevezetjük az

$$\begin{aligned}\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{f^0} A \\ \beta &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{f^0} (B - QA)\end{aligned}\quad (10.2.4)$$

operátorokat. (10.2.2) és (10.2.3) egyenletek alkalmas lineárkombinációi  $\alpha$  és  $\beta$  operátorokkal így írhatók fel:

$$[\alpha, \beta] = -2(\alpha Q)\alpha \quad (10.2.5a)$$

$$\beta Q = 0 \quad (10.2.5b)$$

$$\alpha Q = \beta \ln f^0 \quad (10.2.5c)$$

$$\alpha f^0 = \beta \varphi^0 \quad (10.2.5d)$$

$$\alpha \varphi^0 = 0. \quad (10.2.5e)$$

$\alpha$  és  $\beta$  operátorok (10.2.5a) kommutátorával  $Q$ -ra hatva és (10.2.5b, c) egyenleteket felhasználva:

$$\beta(f^{0-3}\beta f^0) = 0. \quad (10.2.6)$$

Ezt az összefüggést (10.2.5b)-vel összevetve látjuk, hogy két eset lehetséges: vagy  $f^{0-3}\beta f^0$  funkcionálja  $Q$ -nak, vagy  $Q$  konstans. Tekintsük először azt az esetet, ha  $Q$  konstans. Ekkor  $\alpha$  és  $\beta$  kommutáló operátorok, ezért a koordináták megválaszthatók a következőképpen (l. 10.1. fejezetet):

$$\alpha = \partial_2, \quad \beta = \partial_3 - Q\partial_2. \quad (10.2.7)$$

(10.2.5c, d és e) egyenletek integrálásával kapjuk:

$$f^0 = P(x + Qy), \quad \varphi^0 = Py. \quad (10.2.8)$$

Itt  $P$  integrációs konstans és  $x, y$  koordináták kezdőpontját úgy választottuk meg, hogy a konstans tagok eltűnjenek (10.2.8)-ban. Az egyenleteknek  $f^0 = \text{konst.}$ ,  $\varphi^0 = \text{konst.}$  is megoldása, azonban ekkor  $\tau = 0$  és így a nyert metrikák a 10.1. fejezetben tárgyalt osztályba tartoznak.

A (10.2.8) felhasználásával kapott legfontosabb térmennyiségek:

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &\equiv f + i\varphi = P \frac{x + ir^{\gamma^0}y}{r^{\gamma^0} + iQ} \\ \xi^2 &= (2rf^0)^{-1/2} r^{\gamma^0/2}, \quad \xi^3 = i(2rf^0)^{-1/2} r^{-\gamma^0/2} \\ g_{ij} &= \begin{bmatrix} 1 & & \\ & f^0 r^{1-\gamma^0} & \\ & & f^0 r^{1+\gamma^0} \end{bmatrix}.\end{aligned}\quad (10.2.9)$$

A négydimenziós ívelem meghatározását  $\omega_i$  kiszámolásával fejezzük be.  $\omega_i$  az előző alfejezetben ismertetett módon (10.1.5) összefüggésből adódik. A teljes



ívelem:

$$ds^2 = -\frac{f^0}{f}(r^{1-\gamma^0} dx^2 + r^{1+\gamma^0} dy^2) + 2dr(dt - 2\gamma^0 Q y dx) + f(dt - 2\gamma^0 Q y dx)^2. \quad (10.2.10)$$

$Q=0$  speciális esetben a metrika nem függ  $y$  koordinátától. A (6.16) görbületi invariánsok vizsgálata azt mutatja, hogy a (10.2.10) ívelemmel megadott téridőre az  $r=0$  helyen szingularitás van és az  $r \rightarrow \infty$ ,  $f < \infty$  határátmenetben a görbület eltűnik. A metrikus tenzor azonban patológikus viselkedést mutat ebben a tartományban:  $r \rightarrow \infty$ -re csak akkor marad reguláris, ha egyidejűleg  $x$  vagy  $y$  koordinátával is alkalmas módon végtelenhez tartunk.

Most áttérünk annak az esetnek a vizsgálatára, ha  $Q$  nem konstans. A következőkben kiintegráljuk (10.2.5) téregyenleteket anélkül, hogy valamilyen kitüntetett koordináta-rendszert használnánk. (10.2.6) szerint

$$f^{0-3} \beta f^0 = q(Q), \quad (10.2.11)$$

ahol  $q$  tetszőleges funkcionálja  $Q$  térmennyiségnek. (10.2.5a) kommutátort  $f^0$ -ra alkalmazva

$$\beta \left[ f^{0-5} \left( \alpha f^0 + \frac{q'}{2q} \beta f^0 \right) \right] = 0 \rightarrow \alpha f^0 = q p(Q) f^{05} - \frac{q'}{2q} \beta f^0. \quad (10.2.12)$$

Itt vesszővel jelöltük a  $Q$  szerint történő deriválást. (10.2.12) és (10.2.5d) összefüggésekből

$$\beta \left( \varphi^0 - \frac{1}{3} p f^{03} + \frac{q'}{2q} f^0 \right) = 0 \rightarrow \varphi^0 = \frac{1}{3} p f^{03} - \frac{q'}{2q} f^0 + s(Q). \quad (10.2.13)$$

A fenti egyenletekben  $p$ ,  $q$  és  $s$  egyelőre tetszőleges funkcionáljai  $Q$ -nak. A  $\varphi^0$ -ra kapott kifejezést (10.2.5e)-be helyettesítjük:

$$\left[ \frac{1}{3} p' f^{02} - \left( \frac{q'}{2q} \right)' f^0 + s' + \left( p f^{02} - \frac{q'}{2q} f^0 \right)^2 f^0 \right] \beta f^0 = 0. \quad (10.2.14)$$

(10.2.5c) szerint  $\beta f^0$  nem tűnik el. Ebből következik, hogy  $Q$  értékét lerögzítve  $f^0$  értéke még változik. Ezért (10.2.14)-ben a szögletes zárójelben foglalt kifejezés nullával egyenlő. Ily módon  $f^0$ -ban polinomiális egyenlethez jutunk. Az egyes  $f^0$  hatványok együtthatói zérusok,

$$p = 0, \quad s' = 0, \quad \left( \frac{q'}{q} \right)' - \frac{1}{2} \left( \frac{q'}{q} \right)^2 = 0. \quad (10.2.15)$$

(2.5) definíció  $\varphi$  értékét tetszőleges valós konstans erejéig határozza meg.  $s$  értéke ezért zérusnak választható. (10.2.15)-ből egyszerű integrálás elvégzése után kapjuk:

$$q = \frac{1}{(aQ + b)^2}, \quad (10.2.16)$$

ahol  $a$  és  $b$  valós konstansok. (10.2.13) felhasználásával adódik az  $f^0$ ,  $\varphi^0$  és  $Q$  függvényekre fennálló

$$\varphi^0 = \frac{a}{aQ + b} f^0 \quad (10.2.17)$$

összefüggés.

Az elmondottak értelmében  $f^0$  és  $Q$  megválaszthatók független koordinátáknak. A kapott kifejezések azonban némileg egyszerűsödnek, ha a koordinátarendszert a következőképpen választjuk meg:

$$Q = \frac{x}{y}, \quad f^0 = \frac{ax+by}{y^2}. \quad (10.2.18)$$

A metrikus tenzor kiszámolása az előző esetekre bemutatott módon történik. Eredmények:

$$\begin{aligned} \varphi^0 &= a/y; \quad f = \frac{ax+by}{x^2 r^{-\gamma^0} + y^2 r^{\gamma^0}}; \\ d\bar{s}^2 &= -\frac{f^0}{f} (r^{1-\gamma^0} dx^2 + r^{1+\gamma^0} dy^2) + 2dr \left( dt - \gamma^0 \frac{x^2}{y} dy \right) + \\ &\quad + f \left( dt - \gamma^0 \frac{x^2}{y} dy \right)^2. \end{aligned} \quad (10.2.19)$$

A görbületi invariánsok ismét eltűnnek az  $r \rightarrow \infty, f < \infty$  határátmenetben. A tér-idő szinguláris helyei:  $r=0$ ,  $y=0$  és  $ax+by=0$ . Alkalmas irányban a végtelenhez tartva, a görbület korlátlanul növekszik.

(10.1.10), (10.2.10) és (10.2.19) ívelemek alkotják a nyírással rendelkező geometikus saját sugarakkal jellemzett forrásmentes stacionárius gravitációs terek egyenleteinek általános megoldását.

### III. RÉSZ

## ELEKTROVÁKUUM

#### 1. Alapfogalmak

Az Univerzumnak azokat a tartományait vizsgáljuk, ahol csak elektromágneses és gravitációs mező van jelen, ettől eltekintve azonban üres a tér. Az ilyen tartományokat *elektrovákuumnak* nevezzük\*. Itt csupán a szimmetrikus  $g_{\mu\nu}$  metrikus tenzor és az antiszimmetrikus  $F_{\mu\nu}$  elektromágneses tértenzor jelenik meg. Kvantumgravitációelmélet hiányában olyan esetekre szorítkozunk, amelyekben a jelenségek leírására használhatók a kvantálatlan csatolt Einstein—Maxwell egyenletek:

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} R = -k T_{\mu\nu}. \quad (1.1)$$

$$F^{\mu\nu}{}_{;\nu} = 0, \quad (1.2)$$

ahol  $T_{\mu\nu}$  az elektromágneses tér energiaimpulzus-tenzora,

$$T_{\mu\nu} = F_{\mu\beta} F_{\nu}{}^{\beta} - \frac{1}{4} g_{\mu\nu} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta}. \quad (1.3)$$

Mivel most  $T_{\mu}{}^{\mu} = 0$ , az Einstein-egyenletek így is írhatók:

$$R_{\mu\nu} = -k T_{\mu\nu}. \quad (1.4)$$

$F_{\mu\nu}$  tértenzort  $A_{\mu}$  négyes potenciálból képezzük.

$$F_{\mu\nu} = A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu}. \quad (1.5)$$

Legyen  $X_{\mu\nu}$  tetszőleges antiszimmetrikus tenzor. Defináljuk  $X_{\mu\nu}^*$  duális tenzort:

$$X_{\mu\nu}^* \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} X^{\rho\sigma} \sqrt{-g}. \quad (1.6)$$

$\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$  teljes antiszimmetriáját felhasználva könnyen igazolhatjuk, hogy kétszeri duálás megfordítja  $X_{\mu\nu}$  előjelét:

$$X_{\mu\nu}^{**} = -X_{\mu\nu}. \quad (1.7)$$

(1.5)-ből az elektromágneses tér duáltjára az

$$F^{\mu\nu}{}_{;\nu} = 0. \quad (1.8)$$

mozgásegyenletet kapjuk. A Maxwell-egyenletek szimmetrikusak az elektromágneses tenzorban és duálisában. Bevezetjük a dualitásforgatás műveletét:

$$\hat{F}_{\mu\nu} = \cos \alpha F_{\mu\nu} + \sin \alpha F_{\mu\nu}^*, \quad (1.9)$$

\* Ezt az elnevezést javasoljuk az angol *electrovac domain, universe* stb. [55] fordítására.



ahol  $\alpha$  tetszőleges valós konstans, a transzformáció paramétere. Az elektrovákuum téregyenletei dualitásforgatásokkal szemben invariánsak. Ezt a tulajdonságot bizonyos esetekben felhasználhatjuk arra, hogy különböző szerkezetű elektrovákuumok téregyenleteit azonos alakúra hozzuk. Így lehetővé válik, hogy elektrovákuum-problémákat visszavezessük ismert esetekre, ha ezek dualitásrotációval elérhetők.

## 2. Stacionárius elektrovákuum

Az elektrovákuumot stacionáriusnak mondjuk, ha a

$$\xi_{\mu;v} + \xi_{v;\mu} = 0 \quad (2.1)$$

Killing-egyenletnek létezik időszerű  $\xi_\mu$  megoldása és a négyespotenciál Lie-deriváltja eltűnik  $\xi_\mu$  tér mentén (I. II. 1. fejezetet és 23. hivatkozást):

$$A_{\mu;v}\xi^v - \xi_{\mu;v}A^v = 0. \quad (2.2)$$

A Killing-vektorhoz illesztett koordinátarendszert használunk, és az ívelem-négyzet<sup>1</sup>

$$ds^2 = -f^{-1}ds^2 + f(dt + \omega_i dx^i)^2, \quad (2.3)$$

ahol  $ds \geq 0$  ívelem a háromdimenziós  $V_3$  teret definiálja (II. 1. fejezet).

F. J. Ernst megmutatta\*, hogy a téregyenletek lehetővé teszik a komplex  $\mathcal{E}$  és  $\Phi$  skalár függvények bevezetését az alábbi definíciókkal:

$$\Phi \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{k}{2}} (A_0 + iA'), \quad \mathcal{E} \stackrel{\text{def}}{=} f - |\Phi|^2 + i\varphi, \quad (2.4)$$

ahol

$$A'_{,i} = \varepsilon_{ijk} (A^{j|k} - \omega^j A_0^{|k}) f \sqrt{g} \quad (2.5a)$$

és

$$\varphi_{,i} = \varepsilon_{ijk} \omega^{j|k} f^2 \sqrt{g} + 2 \operatorname{Im} (\Phi \Phi_{,i}). \quad (2.5b)$$

E jelölésmódban a téregyenletek így írhatók fel\*\*:

$$(\operatorname{Re} \mathcal{E} + |\Phi|^2) \Delta \mathcal{E} = (\nabla \mathcal{E} + 2\bar{\Phi} \nabla \Phi) \nabla \mathcal{E} \quad (2.6a)$$

$$(\operatorname{Re} \mathcal{E} + |\Phi|^2) \Delta \Phi = (\nabla \mathcal{E} + 2\bar{\Phi} \nabla \Phi) \nabla \Phi \quad (2.6b)$$

$$R_{ij} = -G_i \bar{G}_j - \bar{G}_i G_j + H_i \bar{H}_j + \bar{H}_i H_j. \quad (2.6c)$$

Itt

$$\mathbf{G} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\nabla \mathcal{E} + 2\bar{\Phi} \nabla \Phi}{2(\operatorname{Re} \mathcal{E} + |\Phi|^2)}, \quad \mathbf{H} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\nabla \Phi}{\sqrt{\operatorname{Re} \mathcal{E} + |\Phi|^2}}, \quad (2.7)$$

(1.9) dualitásrotációk most a

$$\hat{\Phi} = e^{ix} \Phi \quad (2.8)$$

\* Ernst [15] dolgozatában az axiálszimmetrikus eset tárgyalására szorítkozik, módszere azonban közvetlenül általánosítható tetszőleges stacionárius elektrovákuumra.

\*\* Lásd a lábjegyzetet a 203. lapon.

alakba írhatók, ahol  $\alpha$  valós konstans.  $\Phi$  az elektromágneses teret jellemző mennyiség: (2.4 és 5) szerint  $\Phi=0$  esetben a négyespotenciál zérus, vagyis nincs jelen elektromágneses tér.

Sztatikus esetben ( $\xi^\mu$  hiperfelületre ortogonális, I. II. 1. fejezetet) érvényes a korábban a szerző által axiálszimmetria feltételezésével talált tétel [41, 18] általánosítása:

*Sztatikus elektrovákumban  $\Phi$  fázisa állandó és  $\mathcal{E}$  valós.*

A bizonyításhoz felhasználjuk azt a II. 1. fejezetben kimondott tételt, amely szerint sztatikus térben mindig létezik olyan koordinátarendszer, ahol  $\tilde{g}_{i0}=0$ , vagyis  $\omega_i=0$ .  $\varphi$  skalár (2.5b) alakjából ebben a koordinátarendszerben — és ezért invarianciaokokból minden más koordinátarendszerben is —

$$i\varphi_i = \Phi \bar{\Phi}_{,i} - \bar{\Phi} \Phi_{,i} \quad (2.9)$$

marad. A  $\varphi_{i|j} - \varphi_{j|i} = 0$  azonosság következménye:

$$\Phi_{,i} \bar{\Phi}_{,j} - \bar{\Phi}_{,i} \Phi_{,j} = 0, \quad (2.10)$$

ahonnan

$$\Phi = \Phi(\bar{\Phi}). \quad (2.11)$$

Ezt a feltételt (2.6b) térgyegyenletbe helyettesítve

$$(\text{Re } \mathcal{E} + |\Phi|^2) \frac{d^2 \Phi}{d\bar{\Phi}^2} (\nabla \bar{\Phi})^2 = 0. \quad (2.12)$$

Itt  $\text{Re } \mathcal{E} + |\Phi|^2 = f$  az időszerű  $\xi^\mu$  Killing-vektor hossz négyzete, ezért sehol sem tűnik el.  $(\nabla \bar{\Phi})^2 = 0$ -ból (2.10) egyenlettel  $\Phi = \text{konst.}$  adódik. Ez a lehetőség a tételnek nem mond ellent, de (2.4 és 5) szerint a  $\Phi' = \Phi + C$  ( $C$  komplex konstans) transzformációkra a térerősség invariáns, ezért ilyenkor az elektromágneses tér eltűnésének speciális esetét kapjuk. (2.12)-ből ezért  $\frac{d^2 \Phi}{d\bar{\Phi}^2} = 0$  következik, ahonnan — a  $\Phi$  meghatározásában jelentkező önkényt felhasználva —

$$\Phi = a\bar{\Phi}, \quad (2.13)$$

ahol  $a$  komplex állandó. (2.9), (2.13) egyenletekből a  $\varphi' = \varphi + C$  ( $C$  valós állandó) invarianciából következik, hogy sztatikus esetben  $\mathcal{E}$  mindig valósnak választható. Ezzel a tételt bebizonyítottuk.

A tétel fontos következménye, hogy az általános sztatikus elektrovákum előállítható egy dualitásforgatással az elektrosztatikus ( $\Phi$  valós [15]) speciális esetből vagy, ekvivalens módon, a magnetosztatikus ( $\Phi$  képzetes) térből.

Érdekes véletlen szimmetria figyelhető meg a sztatikus elektrovákum és a stationárius forrásmentes eset ( $\Phi=0$ ) térgyegyenletei között. Sztatikus elektrovákumban  $\mathcal{E}$  és  $\Phi$  valósnak vehető; a térgyegyenletek:

$$\begin{aligned} (\mathcal{E} + \Phi^2) \Delta \mathcal{E} &= \nabla(\mathcal{E} + \Phi^2) \nabla \mathcal{E} \\ (\mathcal{E} + \Phi^2) \Delta \Phi &= \nabla(\mathcal{E} + \Phi^2) \nabla \Phi \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$R_{ij} = -\frac{1}{4} [\nabla \ln(\mathcal{E} + \Phi^2)]^2 + \frac{(\nabla \Phi)^2}{\mathcal{E} + \Phi^2}.$$

Forrásmentes stacionárius terekre  $\Phi=0$ ,  $\mathcal{E}=f+i\varphi$  és

$$\begin{aligned} f\Delta f &= (\nabla f)^2 - (\nabla \varphi)^2 \\ f\Delta \varphi &= 2\nabla f \nabla \varphi \\ R_{ij} &= -\frac{(\nabla f)^2 + (\nabla \varphi)^2}{4f^2} \end{aligned} \quad (2.15)$$

(2.14)-ből az

$$\begin{aligned} f^2 &= \mathcal{E} + \Phi^2 \\ \varphi &= i\Phi \end{aligned} \quad (2.16)$$

megfeleltetéssel (2.15) egyenleteket kapjuk. (2.16) komplex transzformáció olyan térmennyiségek között, amelyekről meg kell követelnünk, hogy valósak legyenek. Ha például (2.16)-ban  $\varphi$  valós, akkor  $\Phi$  tisztán képzetesnek adódik. Ezért (2.16) valójában nem a (2.14) egyenletekkel meghatározott valós  $\varphi$  függvényre, hanem annak komplex analitikus kiterjesztésére alkalmazandó. A komplex  $\varphi$ -ben úgy kell megválasztanunk az integrációs konstansokat, hogy (2.16) valós  $\Phi$  térmennyiséget szolgáltatson.

A módszert a Kerr-megoldásból származó sztatikus elektrovákuum példáján mutatjuk be. A (II. 3.14) Kerr-tér komplex  $a$  értékekre is megoldása (2.15) egyenleteknek. (II. 3. 18) szerint most

$$\varphi = \frac{2ma \cos \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}. \quad (2.17)$$

$\Phi$  valósnak adódik (2.16)-ból, ha  $\varphi$ -ben a konstansot képzetesnek vesszük. Ezért, az  $a \rightarrow ia$  helyettesítést alkalmazva:

$$\Phi = \frac{2ma \cos \vartheta}{r^2 - a^2 \cos^2 \vartheta}, \quad (2.18)$$

ahol  $a$  valós konstans. A teljes ívelem:

$$\begin{aligned} ds^2 &= -N^2(r^2 - a^2 \cos^2 \vartheta)^2 [(r-m)^2 - \cos^2 \vartheta (a^2 + m^2)]^{-3} [dr^2 ((r-m)^2 - (a^2 + m^2))^{-1} + d\vartheta^2] - \\ &- N^{-2} [(r-m)^2 - (a^2 + m^2)] (r^2 - a^2 \cos^2 \vartheta)^2 \sin^2 \vartheta d\varphi^2 + (r^2 - a^2 \cos^2 \vartheta)^{-2} dt^2. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Itt  $N = (r-m)^2 - m^2 + a^2 \cos^2 \vartheta$ . A Bonnor-féle elektrovákuum [5] általánosítását kapjuk meg. Az általánosítás abból származik, hogy a jelen formalizmusban (2.18)-ból dualitásrotációkkal (2.8) további elektrovákuum-megoldásokat nyerünk [42].

Az elektrovákuum téregyenleteinek újabb szimmetriatulajdonságait tárja fel a komplex  $\xi$  és  $q$  térmennyiségek bevezetése az alábbi definíciós egyenletekkel:

$$\mathcal{E} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\xi - 1}{\xi + 1}, \quad \Phi \stackrel{\text{def}}{=} \frac{q}{\xi + 1}, \quad (2.20)$$



$\xi$  és  $q$  skalárokkal és téregyenletek így írhatók fel:

$$(\xi \bar{\xi} + q \bar{q} - 1) \Delta \xi = 2[\bar{\xi}(\nabla \xi)^2 + \bar{q} \nabla q \nabla \xi] \quad (2.21a)$$

$$(\xi \bar{\xi} + q \bar{q} - 1) \Delta q = 2[\bar{q}(\nabla q)^2 + \bar{\xi} \nabla \xi \nabla q] \quad (2.21b)$$

$$R_{ij} = -2(\xi \bar{\xi} + q \bar{q} - 1)^{-2} \operatorname{Re} [(1 - q \bar{q}) \xi_{,i} \bar{\xi}_{,j} + (1 - \xi \bar{\xi}) q_{,i} \bar{q}_{,j} + \\ + \bar{\xi} q \xi_{,i} \bar{q}_{,j} + \xi \bar{q} \bar{\xi}_{,i} q_{,j}]. \quad (2.21c)$$

Ez az alak szimmetrikus  $\xi$  és  $q$  felcserélésével szemben.  $q=0$ -re visszkapjuk a (II. 1. 22,23) vákuumegyenleteket. Az általánosabb  $q=q^0$ =konstans feltevessel:

$$(\xi \bar{\xi} + q^0 \bar{q}^0 - 1) \Delta \xi = 2\bar{\xi}(\nabla \xi)^2 \quad (2.22a)$$

$$R_{ij} = -2(\xi \bar{\xi} + q^0 \bar{q}^0 - 1)^{-2} \operatorname{Re} (1 - q^0 \bar{q}^0) \xi_{,i} \bar{\xi}_{,j}. \quad (2.22b)$$

$\xi \rightarrow \xi \sqrt{1 - q^0 \bar{q}^0}$  helyettesítéssel  $|q^0| < 1$  esetén a téregyenletek azonos alakúak lesznek az üres térre vonatkozó (II. 1. 22,23) egyenletekkel\*. Mint arra Ernst [15] rámutatott, e szimmetria segítségével adott vákuummegoldásból meg lehet konstruálni annak „elektrovákuum-párját”. Legyen ugyanis  $\xi$  (II. 1. 22,23) egyenletek egy megoldása. Ekkor tetszőleges komplex konstansra  $\xi/\sqrt{1 - q^0 \bar{q}^0}$  a mondottak értelmében az elektrovákuum téregyenleteinek megoldása. E megoldások lehetővé tették Ernst számára, hogy a Kerr-megoldásból elektrovákuum-ívelemet vezessen le. Az ívelem:

$$d\bar{s}^2 = -(r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) [d\vartheta^2 + (r^2 + a^2 - 2mr + e^2)^{-1} dr^2] - \\ - \left[ (r^2 + a^2) \sin^2 \vartheta d\varphi^2 - dt^2 + \frac{2mr - e^2}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} (dt + a \sin^2 \vartheta d\varphi)^2 \right]. \quad (2.23)$$

A megfelelő elektromágneses potenciál:

$$A_1 = A_2 = 0, \\ A_3 = -\frac{ear \sin^2 \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}, \quad A_0 = \frac{er}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}. \quad (2.24)$$

Ez a téridő — a Kerr-megoldás elektrovákuum-párja — azonos a korábban Newman és munkatársai [37] által (talán transzcendens logikájának nevezhető módszerrel) talált elektrovákuummal. A Newman-féle módszer [37] bemutatására itt nem térünk ki, megjegyezzük azonban, hogy a benne szereplő intuitív elemek következtében nem lehet megállapítani, milyen feltételek teljesülésekor alkalmazható a téregyenletekre.

A stacionárius elektrovákuum-egyenletek legáltalánosabb folytonos belső szimmetriáját G. Neugebauernek és D. Kramernek sikerült megtalálnia [32].  $\mathcal{E}$  és  $\Phi$

\* Lukács B. és Perjés Z., GRG Journal, 4, 161 (1973)

térmennyiségekre e transzformációk alakja\*:

$$\mathcal{E}' = \alpha \bar{\alpha} X [\mathcal{E} - 2\bar{\mu}\Phi - \mu\bar{\mu} + i\gamma], \quad (2.25a)$$

$$\Phi' = \alpha X [\Phi + \mu + \beta (\mathcal{E} - 2\bar{\mu}\Phi - \mu\bar{\mu} + i\gamma)]. \quad (2.25b)$$

ahol

$$X^{-1} \stackrel{\text{def}}{=} 1 - 2\bar{\beta}(\Phi + \mu) + i(i\lambda - \beta\bar{\beta})(\mathcal{E} - 2\bar{\mu}\Phi - \mu\bar{\mu} + i\gamma). \quad (2.25c)$$

$\alpha$ ,  $\beta$  és  $\mu$  komplex konstansok,  $\gamma$  és  $\lambda$  pedig valós konstansok (összesen nyolc valós paraméter). Az identitástranszformációt a paraméterek

$$\alpha = 1, \quad \beta = \mu = \lambda = \gamma = 0 \quad (2.26)$$

választásával kapjuk.

Megjegyezzük még, hogy a stacionárius elektrovákuum egyenletei felírhatók a (2.7) definíciókkal megadott komplex  $\mathbf{G}$  és  $\mathbf{H}$  vektorok segítségével [43]:

$$\begin{aligned} (\nabla - \mathbf{G})\mathbf{G} &= \bar{\mathbf{H}}\mathbf{H} - \bar{\mathbf{G}}\mathbf{G} \\ \nabla \times \mathbf{G} &= \bar{\mathbf{H}} \times \mathbf{H} - \bar{\mathbf{G}} \times \mathbf{G} \\ (\nabla - \mathbf{G})\mathbf{H} &= \frac{1}{2}(\mathbf{G} - \bar{\mathbf{G}})\mathbf{H} \\ \nabla \times \mathbf{H} &= -\frac{1}{2}(\mathbf{G} + \bar{\mathbf{G}}) \times \mathbf{H}. \\ R_{ij} &= -G_i \bar{G}_j - \bar{G}_i G_j + H_i \bar{H}_j + \bar{H}_i H_j. \end{aligned} \quad (2.27)$$

A probléma Lagrange-függvénye:

$$L = R + 2(\bar{\mathbf{G}}\mathbf{G} - \bar{\mathbf{H}}\mathbf{H}). \quad (2.28)$$

A  $V_3$  térben történő invariáns osztályozás során  $P_j^i$  tenzor  $\lambda$  sajátértékeire (II. 3. fejezet) elektrovákuumban az alábbi kifejezéseket kapjuk [43]:

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= \frac{2}{3}(|\mathbf{G}|^2 - |\mathbf{H}|^2), \\ \lambda_{\pm} &= -\frac{1}{3}(|\mathbf{G}|^2 - |\mathbf{H}|^2) \pm \{ |G|^2 + |H|^2 - 2|\mathbf{GH}|^2 + 2|G^2 H^2 - (\mathbf{GH})^2 \}^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

A degeneráció feltételéből, a  $\lambda_0 = \lambda_+$  összefüggésből

$$(\bar{\mathbf{G}} \times \mathbf{G} - \bar{\mathbf{H}} \times \mathbf{H})^2 = -4|\mathbf{G} \times \mathbf{H}|^2. \quad (2.30)$$

Az elektrovákuum  $D$  típusú az invariáns osztályozásban, ha (2.30) fennáll  $\mathbf{G}$  és  $\mathbf{H}$  vektorokra. Ellenkező esetben a típus  $G$  (I. II. 3. fejezetet). A  $D$  típusú elektrovákuumok közé sorolhatók a Weyl-terek [62], amelyek a sztatikus axiálszimmetrikus ürestér-megoldások elektrovákuum-párjai. Ugyancsak  $D$  típusú a Bonnor-féle (2.19) tér. A  $G$  típusú terek példája a Kerr-megoldás (2.23) elektrovákuum-párja.

A forrásmentes esettel ellentétben, az elektrovákuum-egyenleteknek ma még nem ismeretes valamennyi  $D$  típusú tengelyszimmetrikus megoldása.

\* A 32. hivatkozásban és az itt használt jelölések kapcsolata:  $\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi$  [32],  $\mu = \delta$  [32],  $\mathcal{E} = F$  [32].

A fennmaradó mennyiségek jelölésében nincs eltérés.

### *Az elmélet további fejlődése e munka megjelenéséig*

D. Robinson bizonyítása [65] 1975-ben tétel rangjára emelte *Israel* sejtését (177. lap) a stacionárius fekete lyukakról. *Tomimatsu* és *Sato* [66] a (II. 2.22-23) stacionárius vákuumegyenletek végtelen egzakt megoldássorozatát találták. E tengelyszimmetrikus terek között a Kerr-féle megoldás (II. 3.14) is megjelenik.

Az elektrovákuum egyenleteinek (III. 2.25) belső szimmetriacsoportjáról *Kinnersley* [67] kimutatta, hogy az  $SU(2,1)$  csoporttal izomorf. Az osztályozásunkban D típusú (III. 2.30) elektrovákuumok széles megoldásoztlályát találta *Israel*, *Wilson* [68] és a szerző [69]. Ezek a terek pörgő testek gravitációs és elektromágneses egyensúlyát írják le. Szerkezetükkel kiterjedt irodalom [70-85] foglalkozik.

### **Összefoglalás**

Az általános relativitáselmélet kereteiben időfüggetlen gravitációs terek tulajdonságait vizsgáltuk. Fontosabb eredményeinket az alábbiakban összegezzük.

1. A stacionárius Einstein-egyenleteket kovariáns módon felbontottuk a háromdimenziós  $V_3$  térre vonatkozó egyenletekre. Ily módon  $V_3$  térben az általános relativitáselmélet alapegyenleteivel megegyező szerkezetű összefüggésekhez jutottunk. A dimenziószám csökkenését a komplex  $G$  vektortér és mozgásegyenleteinek megjelenése kíséri. Javasoltuk, hogy stacionárius problémák tárgyalására a gravitációelméletben kidolgozott módszerek  $V_3$  térben újra felhasználhatók. Ezt az elvet háromdimenziós „relativitáselméletnek” neveztük.

2. Bevezettük a stacionárius terek invariáns osztályozását a háromdimenziós relativitáselmélet segítségével. Megmutattuk, hogy a lehetséges típusok száma kettő.

3. Általánosított  $SU(2)$  spinorformalizmust dolgoztunk ki háromdimenziós görbült terekre. Normált bázist vezettünk be a spintérben és így módon eljutottunk az  $SU(2)$  spin koefficiensek módszeréhez.

4. Felírtuk a stacionárius gravitációs egyenleteket  $SU(2)$  spin koefficiensekkel.

5. Bevezettük a saját sugar fogalmát. Vizsgáltuk a saját sugarak geometriai jelentését, és megmutattuk, hogy a geometrikus saját sugarak akkor és csakis akkor párhuzamosak a görbületi tenzor főirányával, ha nyírásmentesek.

6. A gravitációs terek invariáns osztályozását tovább finomítottuk a saját sugarak geometriai tulajdonságainak figyelembevételével. Megmutattuk, hogy a Kerr-megoldás nyírásmentes geodetikus saját sugarakkal rendelkezik.

7. Bebizonyítottuk, hogy geodetikus saját sugarak nem rotálhatnak és nyírhatnak egyidejűleg. Az összes olyan üres terek, amelyekre a nyírás nem tűnik el, a cilindrikus típusba tartoznak.

8. Megadtuk a forrásmentes stacionárius gravitációs egyenletek általános megoldását nyíró geodetikus saját sugarakra. Ennek során a gravitációs egyenletek két új egzakt megoldását találtuk.

9. Kölcsönható elektromágneses és gravitációs terekből álló rendszerekre javasoltuk az elektrovákuum elnevezést. Felírtuk a stacionárius elektrovákuum téregyenleteit a komplex  $G$  és  $H$  vektorok segítségével. Megadtuk a téregyenletek szimmetrikus alakját.

10. Bebizonyítottuk, hogy sztatikus elektrovákuumban a  $\Phi$  komplex elektromágneses potenciál fázisa konstans. E tétel következménye, hogy az általános sztatikus elektrovákuum előállítható egy dualitásforgatással akár az elektrosztatikus, akár a magnetosztatikus alesetből.

### **Köszönetnyilvánítások**

Időfüggetlen gravitációs terekre vonatkozó munkám kezdetei egyetemi tanulmányaim idejéig nyúlnak vissza. Az általános relativitáselméletet Nagy Kázmér professzor előadásából ismertem meg. Szerencsés helyzetben voltam, hiszen oly megbecsülendő az a könnyen követhető, a problémákat nem elkendőző előadásmód, amely mindig jellemző volt ezekre a speciálkollégiumokra.

Munkámat mindvégig érdeklődéssel kísérte és kezdeti nehézségeimen sok rendkívül értékes tanáccsal segített át dr. Károlyházi Frigyes egy. tanár. Köszönettel tartozom önzetlen segítőkészségért, amelyre minden tekintetben számíthattam.



Szeretném megköszönni továbbá közvetlen munkatársaimnak, a Központi Fizikai Kutatóintézet Nagyelektromágnesi Fizikai Főosztályán dolgozó elméleti kutatóknak, hogy szemináriumok és diszkussziók során segítettek számos esetben a problémák világosabb áttekintésében, és kritikus észrevételeikkel lehetővé tették az eredmények tisztább megfogalmazását.

Köszönetet mondok Kóta József kollégámnak, akivel együttműködve sikerült a II. 9. fejezetben ismertetett tételt bebizonyítani és az Einstein-egyenletek új egzakt megoldásait (II. 10. fejezet) levezetni. Hálával tartozom dr. Györgyi Géának (KFKI), Roy Patrick Kerr és Ivor Robinson professzoroknak (University of Texas), dr. Gernot Neugebauernek (Max-Planck-Institut für Physik), Ezra Theodore Newman professzornak (University of Pittsburgh), Achille Papapetrou professzornak (Institut Henri Poincaré) és Roger Penrose professzornak (Birkbeck College) értékes diszkusszióikért és tanácsokért. Szeretném megköszönni e helyen is a *Società Italiana di Fisica*-nak, hogy az általa nyújtott ösztöndíjjal 1969-ben a varennai Enrico Fermi Iskolán a gravitációelmélet számos modern módszerét megismerhettem.

Hálás vagyok a KFKI Nagyelektromágnesi Fizikai Főosztályának, amelynek dolgozójaként kutatásaimon munkálkodhattam.

Végül köszönet illeti Gelsi Tivadarnét, aki e disszertáció kivitelezésével kapcsolatban a gépelési munkákat végezte, és Szabó Évát a képletírás fárasztó munkájának gondos elvégzéséért.

### A. Függelék:

#### Az összekötő mennyiségek

A spinorok és világtenzorok között a  $\sigma_{AB}^\mu$  összekötő mennyiségek teremtenek kapcsolatot [4.33]. Rögzített  $\mu$ -re  $[\sigma_{AB}^\mu]$  mátrix hermitikus és  $\sigma_{AB}^\mu$  megoldása a

$$\sigma_{\mu AC'} \sigma_{\nu B}^{C'} + \sigma_{\nu AC'} \sigma_{\mu B}^{C'} = g_{\mu\nu} \varepsilon_{AB} \quad (\text{A.1})$$

egyenleteknek (I. 1. fejezet). Az ily módon definiált összekötő mennyiségek létezését most úgy bizonyítjuk, hogy egyúttal megadjuk azt az eljárást is, amellyel e mennyiségek megkonstruálhatók.

A négydimenziós világ tetszőleges reguláris pontjában bevezethető olyan ortogonális  $v_m^\mu = (T^\mu, X^\mu, Y^\mu, Z^\mu)$ ,  $m=0, 1, 2, 3$  vektorbázis, amelyre [59]

$$T_\mu T^\mu = -X_\mu X^\mu = -Y_\mu Y^\mu = -Z_\mu Z^\mu = 1. \quad (\text{A.2})$$

Tetszőleges  $a^\mu$  vektor kifejezhető a bázisvektorok alkalmas lineárkombinációjaként:

$$a^\mu = a_0 T^\mu - a_1 X^\mu - a_2 Y^\mu - a_3 Z^\mu, \quad (\text{A.3})$$

ahol  $a_m$  ( $m=0, 1, 2, 3$ ) együtthatók így adhatók meg<sup>1</sup>

$$a_m = a_\varrho v_m^\varrho, \quad (\text{A.4})$$

(A.3) és (A.4) összefüggésekből

$$a^\mu \equiv g^{\mu\varrho} a_\varrho = (T^\mu T^\varrho - X^\mu X^\varrho - Y^\mu Y^\varrho - Z^\mu Z^\varrho) a_\varrho. \quad (\text{A.5})$$

(A.5) tetszőleges  $a^\mu$  vektorra fennáll, ezért írhatjuk:

$$T^\mu T^\nu - X^\mu X^\nu - Y^\mu Y^\nu - Z^\mu Z^\nu = g^{\mu\nu}. \quad (\text{A.6})$$

A kapott egyenlet ekvivalens (A.2) ortogonalitási relációkkal. A fenti levezetés szerint ugyanis (A.6) következménye (A.2)-nek, másrészt — mint a báziselemekkel kontrahálva könnyen igazolhatjuk — az ortogonalitási összefüggések következnek (A.6)-ból.

(A.6) egyenlet nem rögzíti le egyértelműen a bázisvektorokat: megengedettek még a

$$v_m^{\mu} = L_m^n v_n^{\mu} \quad (\text{A.7})$$

alakú elforgatások, amelyekre  $[L_m^n]$  együtthatómátrix megőrzi az ortogonalitási viszonyokat tartalmazó (A.6) összefüggés alakját:

$$v_m^{\mu} v_n^{\nu} g^{mn} = v_m^{\mu} v_n^{\nu} g^{\mu\nu}, \quad (\text{A.8})$$

ahol

$$g^{mn} = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (\text{A.9})$$

(A.7) behelyettesítésével

$$v_r^{\mu} L_m^r g^{mn} L_n^s v_s^{\nu} = v_m^{\mu} v_n^{\nu} g^{mn}. \quad (\text{A.10})$$

Innen

$$L_m^r g^{mn} L_n^s = g^{rs}. \quad (\text{A.11})$$

(A.11) értelmében a bázisvektorok forgatásai (röviden: *tetrádrotációk*) a Lorentz-transzformációkkal izomorf csoportot alkotnak. Megjegyezzük, hogy (A.7) tetrádrotációk az  $\mathbf{m}, \mathbf{n}, \dots$  skalár indexekre ható műveletek. A koordináta-transzformációk a  $\mu, \nu, \dots$  indexekre hatnak. A bázisvektorok például így transzformálандók új koordinátákra történő áttéréskor:

$$v_m^{\mu'} = \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial x^{\nu}} v_m^{\nu}. \quad (\text{A.12})$$

A báziselemekből kétdimenziós hermitikus vektormátrixot képezünk.

$$[\sigma^{\mu}] = \begin{bmatrix} T^{\mu} + Z^{\mu} & X^{\mu} - iY^{\mu} \\ X^{\mu} + iY^{\mu} & T^{\mu} - Z^{\mu} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

$[\sigma^{\mu}]$  felépítéséből következik, hogy koordinátatranszformációk hatására

$$[\sigma^{\mu'}] = \frac{\partial x^{\mu'}}{\partial x^{\nu}} [\sigma^{\nu}]. \quad (\text{A.14})$$

Tetrádrotatranszformációk alkalmával  $[\sigma^{\mu}]$  így transzformálódik [47]:

$$\sigma_{AB'}^{\mu} = A_A^R \sigma_{RS'}^{\mu} A_{B'}^{S'}, \quad (\text{A.15})$$

ahol  $A_A^R$  mennyiségek komplex unimoduláris mátrix elemei. Célszerűnek mutatkozik a  $[\bar{A}]$  mátrixszal transzformálандó indexeket vesszőzéssel megkülönböztetni  $[4]^1$  a  $[A]$ -val transzformálандó indexektől.

(A.13) konstrukció és a bázis (A.6) tulajdonsága értelmében  $\sigma_{AB'}^{\mu}$  mennyiségek kielégítik (A.1) összefüggést.

## B. Függelék:

### $[\sigma_{AB}^i]$ mátrixok kommutátorai

II. 4. fejezetben bevezettük  $\sigma_{AB}^i$  mennyiségeket az alábbi definíciókkal:

$$\sigma_{AB}^i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sqrt{2}}{f} \sigma_A^{iC'} \sigma_{0BC'}. \quad (11.4.4), (\text{B.1})$$

Most a

$$\sigma_{\mu AC'} \sigma_{\nu B}^{C'} + \sigma_{\nu AC'} \sigma_{\mu B}^{C'} = \tilde{g}_{\mu\nu} \varepsilon_{AB} \quad (\text{B.2})$$

összefüggésekre támaszkodva\* levezetjük a  $[\sigma_{AB}^i]$  mátrixokra vonatkozó kommutációs szabályokat. Ebből a célból definiáljuk a  $\sigma_{AB'}^\mu$  mennyiségek  $M_{\mu\nu}^{AB}$  antiszimmetrizált szorzatát<sup>1</sup>:

$$M_{\mu\nu}^{AB \text{ def}} = \sigma_{[\mu}^{AC'} \sigma_{\nu]}^{B'}. \quad (\text{B.3})$$

(B.2) segítségével felírjuk az  $M_{\mu\nu}^{AB}$ -re vonatkozó kommutátorokat:

$$\begin{aligned} [M_{\alpha\beta B}^A, M_{\gamma\delta}^{BD}] &\equiv M_{\alpha\beta B}^A M_{\gamma\delta}^{BD} - M_{\gamma\delta B}^A M_{\alpha\beta}^{BD} = \\ &= \tilde{g}_{\alpha\delta} M_{\beta\gamma}^{AD} - \tilde{g}_{\beta\delta} M_{\alpha\gamma}^{AD} + \tilde{g}_{\beta\gamma} M_{\alpha\delta}^{AD} - \tilde{g}_{\alpha\gamma} M_{\beta\delta}^{AD}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Rögzített  $\mu$  és  $\nu$  értékekre  $[M_{\mu\nu}^{AB}]$  mennyiségek kétdimenziós mátrixok, melyek (B.4) szerint együttesen a Lorentz-csoport generátorainak kétdimenziós ábrázolását alkotják. Az 51. hivatkozásban bemutatott gondolatmenetet követve bevezetjük az

$$M_i^{+AB \text{ def}} = \frac{1}{2} \left( \pm M_0^{ABj} g_{ij} + \frac{1}{2} i \varepsilon_{ijk} M^{jkAB} \sqrt{g} \right) f^{-1} \quad (\text{B.5})$$

mennyiségeket, amelyekre (B.4)-ből az alábbi kommutátorokat kapjuk:

$$\begin{aligned} [M_i^{\pm AB}, M_j^{\mp BD}] &= 0 \\ [M_i^{\pm AB}, M_j^{\pm BD}] &= i \varepsilon_{ijk} M^{\pm kAD} \sqrt{g}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Ezek a kommutációs törvények a kétdimenziós szimmetrikus  $[M_i^{\pm AB}]$  mátrixokra csak akkor állhatnak fenn, ha vagy  $M_i^{+AB}=0$  vagy  $M_i^{-AB}=0$ . A helykoordináták  $x^{i'} = -x^i$  alakú tükrözésére a  $+$  és  $-$  indexek felcserélődnek. Tükrözéssel tehát mindig elérhető, hogy  $M_i^{+AB}=0$  teljesüljön. (B.5) szerint ekkor

$$M_{AB}^{-i} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_{AC}^i. \quad (\text{B.7})$$

Ezt az eredményt (B.6)-ba helyettesítve megkapjuk a keresett kommutátorokat:

$$[\sigma_{iB'}^A, \sigma_j^{BD}] = \sqrt{2} i \varepsilon_{ijk} \sigma^{kAD} \sqrt{g}. \quad (\text{B.8})$$

## IRODALOM

1. J. L. Anderson: Principles of Relativity Physics. Academic Press, 1967.
2. R. Arnowitt, S. Deser and C. W. Misner, Phys. Rev. 117, 1545, 1960.
3. R. Arnowitt, S. Deser and C. W. Misner: Gravitation: An Introduction to Current Research. Wiley, 1962.
4. W. L. Bade and H. Jehle, Rev. Mod. Phys. 25, 714, 1953.
5. W. Bonnor, Z. Physik, 190, 444, 1966.
6. C. Brans and R. H. Dicke, Phys. Rev. 124, 925, 1961.
7. B. Carter, Phys. Rev. 174, 1559, 1968.
8. B. Carter, Phys. Rev. Letts. 26, 331, 1971.
9. R. H. Dicke: Gravitation and Relativity. Benjamin, 1964.
10. J. Ehlers and W. Kundt, Gravitation: An Introduction to Current Research. Wiley, 1962.

\* A következőkben a metrika (II. 2.3) alakú felbontását használjuk, ezért mindvégig tildézéssel<sup>1</sup> különböztetjük meg a  $V_4$  téren definiált mennyiségeket. (B. 2) egyenlet fennállását A. Függelékben bizonyítottuk.



11. A. Einstein, *Ann. Physik* 49, 769, 1916.
12. A. Einstein: *The Meaning of Relativity*. Princeton Univ. Press, 1953.
13. L. P. Eisenhart: *Riemannian Geometry*. Princeton Univ. Press, 1950.
14. F. J. Ernst, *Phys. Rev.* 167, 1175, 1968.
15. F. J. Ernst, *Phys. Rev.* 168, 1415, 1968.
16. F. J. Ernst, preprint PORS IIT-7, 1968.
17. A. Friedman, *Zeitschr. f. Physik* 10, 377, 1922.
18. R. Gautreau and R. Hoffman, *Phys. Rev.* D2, 271, 1970.
19. B. K. Harrison, K. S. Thorne, M. Wakano and J. A. Wheeler: *Gravitation Theory and Gravitational Collapse*. Univ. of Chicago Press, 1965.
20. L. Infeld and B. L. van der Waerden, *Sitzber. preuss. Akad. Wiss. Physik-math. Kl.* 9, 380, 1933.
21. W. Israel, *Phys. Rev.* 164, 1776, 1967.
22. W. Israel, *Nature* 216, 148 és 312, 1967.
23. W. Israel, *Commun. Math. Phys.* 8, 245, 1968.
24. R. P. Kerr, *Phys. Rev. Letts.* 11, 237, 1963.
25. J. Kóta and Z. Perjés, *J. Math. Phys.* 13, 1695, 1972.
26. W. Kundt, *Z. Physik* 163, 77, 1961.
27. H. Levy, *Nuovo Cimento* 56B, 253, 1968.
28. A. Lichnerowicz: *Théories relativistes de la gravitation*. Masson, 1964.
29. C. V. Misner: *Astrophysics and General Relativity*. Gordon and Breach, 1969.
30. D. O. Muhleman, R. D. Ekers and E. B. Fomalont, *Phys. Rev. Letts.* 24, 1377, 1970.
31. Novobátzky K.: *A relativitás elmélete*. Tankönyvkiadó, 1964.
32. G. Neugebauer, D. Kramer, preprint.
33. E. T. Newman and R. Penrose, *J. Math. Phys.* 3, 566, 1962.
34. E. T. Newman and R. Penrose, *J. Math. Phys.* 7, 863, 1966.
35. E. T. Newman and L. Tamburino, *J. Math. Phys.* 3, 902, 1962.
36. E. T. Newman, and A. Janis, *J. Math. Phys.* 6, 891, 1965.
37. E. T. Newman, E. Couch, K. Chinnapared, A. Exton, A. Prakash and R. Torrence, *J. Math. Phys.* 6, 918, 1965.
38. A. Papapetrou, *Ann. Physik* 12, 309, 1953.
39. A. Papapetrou, *Ann. Inst. Poincaré* 4, 83, 1966.
40. R. Penrose, *Ann. Physik* 10, 171, 1960.
41. Z. Perjés, *Acta Physica* 25, 393, 1968.
42. Z. Perjés, *Nuovo Cimento* 55B, 600, 1968.
43. Z. Perjés, *Commun. Math. Phys.* 12, 275, 1969.
44. Z. Perjés, *J. Math. Phys.* 11, 3383, 1970.
45. A. 3. Пемпов, Новые методы в общей теории относительности Наука, 1966.
46. F. A. E. Pirani: *Recent Developments in General Relativity*, Pergamon, 1962.
47. F. A. E. Pirani: *Lectures on General Relativity*. Prentice-Hall, 1965.
48. I. Robinson, *J. Math. Phys.* 2, 290, 1961.
49. I. Robinson and A. Trautman, *Phys. Rev. Letts.* 4, 431, 1960 és *Proc. Roy. Soc. London*, 265A, 463, 1961.
50. R. K. Sachs, *Proc. Roy. Soc. (London)* 264A, 309, 1961 és 270A, 130, 1962.
51. S. Schweber: *An Introduction to Quantum Field Theory*. Row, Peterson and Co., 1961.
52. G. A. Seielstad, R. A. Sramek and K. W. Weiler, *Phys. Rev. Letts.* 24, 1373, 1970.
53. I. I. Shapiro, M. E. Ash, R. P. Ingalls, W. B. Smith, D. B. Campbell, R. B. Dyce, R. I. Jurgens and G. H. Pettengill, *Phys. Rev. Letts.* 26, 1132, 1971.
54. Ja. A. Szmorogyinszkij, *Magyar Fizikai Folyóirat* 14, 233, 1966.
55. J. L. Synge: *Relativity — The General Theory*. North-Holland Publishing Co., 1960.
56. G. Tauber, *Canad. Journal of Phys.* 35, 477, 1957.
57. H. Thirring and J. Lense, *Phys. Z.* 19, 156, 1918.
58. R. C. Tolman: *Relativity, Thermodynamics and Cosmology*, Clarendon, 1950.
59. A. Trautman, *Lectures on General Relativity*, Prentice-Hall, 1965.
60. T. W. Unti and R. J. Torrence, *J. Math. Phys.* 7, 535, 1966.
61. J. Weber, *Előadás a bécsi Tudományegyetemen*. 1970.
62. H. Weyl, *Ann. Physik* 54, 117, 1917.
63. K. Yano: *The Theory of Lie Derivatives and its Application Interscience*, 1957.
64. A problémakört részletesen tárgyalták 1971-ben a 6. Gravitációs és általános relativitáselméleti konferencián elhangzott előadásokon. A konferencia előadásainak anyaga 1972–73 folyamán megjelent a *General Relativity and Gravitation* című folyóiratban.

65. *D. Robinson*, Phys. Rev. Letters *34*, 905, 1975.
66. *A. Tomimatsu. and H. Sato*, Phys. Rev. Letters *29*, 1344, 1972.
67. *D. Kinnersley*, J. Math. Phys. *14*, 651, 1973.
68. *W. Israel and G. Wilson*, J. Math. Phys. *13*, 865, 1972.
69. *Z. Perjés*, Phys. Rev. Letters *27*, 1668, 1971.
70. *W. Bonnor and J. P. Ward*, Commun. Math. Phys. *28*, 323, 1972.
71. *L. Parker, R. Ruffini and D. Wilkins*, Bull. Am. Phys. Soc. *M17*, 449, 1972.
72. *R. J. Adler, J. Mark, C. Sheffield and M. M. Schiffer*, J. Math. Phys. *14*, 52, 1973.
73. *J. Tiomno*, Phys. Rev. *7D*, 356, 1973.
74. *P. McGuire*, Bull. Am. Phys. Soc. *M18*, 768, 1973.
75. *L. Parker*, Phys. Rev. *7D*, 2874, 1973.
76. *W. Israel and T. Spanos*, Nuovo Cim. Letters *7*, 245, 1973.
77. *W. Bonnor*, Commun. Math. Phys. *34*, 77, 1973.
78. *T. J. T. Spanos*, Phys. Rev. *9D*, 1633, 1974.
79. *R. Kobiske and L. Parker*, Phys. Rev. *10D*, 2321 1974.
80. *J. P. Ward*, Commun. Math. Phys. *34*, 123, 1973.
81. *L. Parker*, Phys. Rev. Letters *34*, 412, 1975.
82. *J. P. Ward*, Int. J. Theor. Phys. *12*, 345, 1975.
83. *F. P. Esposito and L. Witten*, Phys. Letters *58B*, 357, 1975.
84. *P. McGuire and R. Ruffini*, Phys. Rev. *12D*, 3019 and 3026, 1975.
85. *M. Y. Wang*, Nuovo Cim. Letters *15*, 505, 1976.





# EINSTEIN ÉS A MOZGÓ TESTEK ELEKTRODINAMIKÁJA\*

## A SPECIÁLIS RELATIVITÁSELMÉLET MEGSZÜLETÉSÉNEK 70. ÉVFORDULÓJÁRA

ILLY JÓZSEF

MTA Izotópintézete, Budapest

Rekonstruáljuk Einstein útját a speciális relativitáselmülethez. Megismerkedünk azokkal a művekkel, amelyek olvasmányai voltak. Megállapítjuk, hogy Einstein nem elméletet, hanem módszert akart létrehozni, s e megállapítást tudománytörténeti állítások helyesbítésére használjuk föl.

### Bevezetés

Einstein 1905-ben megjelent egyik cikkének címét, „A mozgó testek elektrodinamikájához” [1], korunk fizikusa kulisszának vélheti: a szerző e konzervatív címmel bizonyára ellensúlyozni akarta az éppen nem konzervatív tartalmat. Valóban, ha e tartalmat önmagában tekintjük, a címet akár el is hanyagolhatjuk, ha azonban történeti összefüggéseibe állítjuk, meg kell állapítanunk, hogy a cím a cikk lényegét fejezi ki. Ennek a felismerésnek komoly következményei vannak Einstein elméletének értékelésére. A következőkben ezt akarom bizonyítani.

G. Holton volt az első, aki Einstein e cikkének szakmai előzményeit kezdte kutatni Einstein életének eseményei között [2]. Úttörő munkáját azonban folytatni kell. Így első feladatunk, hogy rekonstruáljuk, mivel és miképp ismerkedett meg Einstein 1905 előtt.

### Einstein forrásai

Elsőnek forduljunk magához a cikkhez. Mit árul el forrásairól? Megütödvé állapíthatjuk meg, hogy előző cikkeiben követett szokásától eltérően, Einstein egyetlen egy hivatkozást nem tesz, csupán barátjának, M. Bessonak köszöni meg segítségét. Ezt a feltűnő eljárást cikkem végén tudom megindokolni. Maradnak tehát a burkolt utalások, valamint maguk a gondolatok, amelyekhez hasonlókat kell keresnünk az elődök és a kortársak írásaiban.

1. A cikk nyitó problémája a következő: amíg a kísérlet arról tanúskodik, hogy a vezetőben mágnes által indukált elektromotoros erő csupán relatív mozgásuktól függ, a Maxwell-elmélet szerint nem mindegy, hogy melyik mozdul el a másikhoz képest. „Ha ugyanis a mágnes mozog, a vezető pedig nyugszik, akkor a mágnes környezetében meghatározott energiaértékű elektromos tér keletkezik, amely azokon a helyeken, ahol a vezető részei tartózkodnak, áramot hoz létre. Ha azonban a

\* Érkezett 1975. III. 15.

mágnes van nyugalomban és a vezető mozog, akkor a mágnes környezetében nem jön létre elektromos erőter, viszont a vezetőben olyan elektromotoros erő keletkezik, amelyhez önmagában semmi energia nem tartozik, de mégis — a szemügyre vett két esetben a relatív mozgás egyenlőségét feltételezve — ugyanakkora nagyságú és ugyanolyan lefolyású elektromos áram létrejöttéhez vezet, mint amekkorát az első esetben az elektromos erők hoztak létre” [1]. Einstein ezt az aszimmetriát „ismertnek” nevezi, valahol tehát rá kell találnunk mások írásaiban is.

2. Ilyesféle áruló jelet találhatunk a fénynyomás matematikai kifejezése mellett: a kifejezés „a tapasztalattal és más elméletekkel jól egyezik” [3]. Érdemes tehát ezeket az elméleteket keresnünk.

3. Einstein a Föld abszolút mozgásának meghatározására tett kísérleteket, elvégzőik nevének említése nélkül, köztudottnak veszi. Úgy tudja, hogy ezeket  $v/c$ -ben csak elsőrendben tudták értelmezni, tehát nem olvashatta Lorentz 1904-es cikkét [4], de régebbi írásait igen.

4. Az induláskor exponált aszimmetria megoldása során, a cikk II., elektrodinamikai részében, a következőképp interpretálja a mozgó rendszerben fellépő elektromotoros erőt:

„1. Ha egy pontszerű elektromos egységpólus elektromágneses térben mozog, akkor reá az elektromos erőn kívül „elektromotoros erő” is hat, amely a  $v/V$  második és magasabb hatványaival szorzott tagok elhanyagolásával az egységpólus mozgássebességének és a mágneses térerősségnek fénysebességgel osztott vektorszorzatával egyenlő. (Régebbi megfogalmazás.)

2. Ha egy pontszerű elektromos egységpólus elektromágneses térben mozog, akkor a reá ható erő egyenlő az egységpólus helyén jelenlevő elektromos térerősséggel, amelyet a térnek az elektromos egységpólushoz viszonyítva nyugalomban levő koordináta-rendszerre való transzformálása révén kapunk meg. (Újabb megfogalmazás.)” [5] Figyelmet kell tehát szentelnünk minden olyan gondolatmenetnek, amelyben az elektromotoros erő fizikai értelmezéséről esik szó.

5. A cikk végén, az elektron merőleges és párhuzamos tömegéről beszélve, Einstein arra figyelmezteti az olvasót, hogy „az erő és a gyorsulás másfajta definíciójával természetesen más értéket kaptunk volna a tömegekre; ebből világos, hogy az elektronmozgás különböző elméleteinek összehasonlítása közben igen óvatosan kell eljárni.” [6] Ez az egymással versengő elektronelméletek ismeretére vall.

6. Fel kell figyelniünk továbbá minden olyan momentumra, amely az abszolút mozgás, abszolút idő és az éter létezése ellen szól, mivel Einstein mindezt elveti. Ezzel egyszersmind rátérünk a cikk tágabban értelmezett, tudományfilozófiai és módszertani előzményeinek keresésére.

7. Végére kell járnunk annak, honnan származik a szerző nyilvánvaló pozitivizmusa, amely abban nyilvánul meg, hogy a jelenségek rendezésére általános elvet keres, és hogy ezzel az absztrakcióval egyidejűleg, a jelenségek téridőbeli meghatározottságát testek, órák és elektromágneses folyamatok kölcsönhatására konkretizálja.

Ezek után térjünk rá azokra a nyilatkozatokra, amelyek kiegészíthetik, értelmezhetik a cikken belüli utalásokat.

Einstein már gimnazista korában ismerte az elektrodinamika alapjelenségeit, a korabeli elméletek főbb vonásait, de forrásairól csak találgathatunk. Egyetemi éveinek tanulmányairól már jóval több adatunk van. 1896-tól 1900-ig látogatta a zürichi Eidgenössische Technische Hochschule-t, a „Polyt”, amelyen Weber adta



elő az elektrodinamikát. Mivel pedig Weber „egyszerűen ignorálta mindazt, ami Helmholtz után történt” [7], Maxwell elméletével, az elektronelmélettel előadásain nem találkozhatott. Így „a többi időt főképp arra használtam, hogy otthon Kirchhoff, Helmholtz, Hertz stb. munkáit tanulmányozzam” [8]. E fizikusok műveiben Einstein sajátos gondolatait keresve Holton úgy véli, hogy a „stb.” mögött *A. Föppl* húzódik meg, mégpedig „Einführung in die Maxwell'sche Theorie der Elektrizität” című művével [9]. P. Frank Einstein-életrajzának ritkaságszámba menő német eredetijében Abraham—Föppl könyvét említi [10], de Holton ezt tévesnek tartja, mivel Einstein a könyv 1. kötetének megjelenésekor, 1904-ben, már nem volt egyetemista. Ámde azt is feltételezhetjük, hogy Frank abban tévedett, hogy Abraham és Föppl közös könyvét Einstein egyetemista korában olvasta, így egyik könyvet sem zárhatjuk ki a források sorából. Föppl említi Einstein veje, Kayser is, Reiser álnéven írt Einstein-életrajzában [11].

Kétséges az is, hogy a „stb.” egyáltalán egyetlen szerzőt takar-e. Évfolyamtársa, Kollros szerint Einstein Helmholtz, Maxwell, Boltzmann és Lorentz műveit olvasgatta [12], s Frank is említi Maxwellt [13], a könyv német eredetijében pedig Maxwell *elméletét*. Maxwell fő művei ezekben az években már megjelentek német fordításban, így semmi akadályja sem lett volna, hogy ne olvassa őket. Így a „stb.” még Maxwellt, Boltzmann és Lorentzet is jelentheti.

A „Poly” elvégzése után, 1900-tól 1903-ig, Einstein doktori értekezésével, majd ennek továbbfejlesztésével, termodinamikával foglalkozott. 1901-től jelennek meg cikkei az *Annalen der Physik*-ben, amelyekben hivatkozik e folyóirat cikkeire. Fel kell tehát tételeznünk, hogy rendszeresen olvasta, legalább a termodinamikai, sugárzáselméleti, elektrodinamikai és elektronelméleti írásokat.

Ez az egyetlen folyóirat is elég volt ahhoz, hogy a kor elektrodinamikai, elektronelméleti, sugárzáselméleti problémáiról, eredményeiről teljes képet kapjon. Elegendő itt Lorentz, Abraham, Wien, Cohn elméleti, Michelson, Fizeau és Kaufmann kísérleti eredményeire utalnom. E nevek jelentősége azonban arra is feljogosít, hogy feltételezzem: Einstein ezeknek a szerzőknek összefoglaló műveit is forgatta. Kizárt pl., hogy ne olvasta volna Lorentznek a korában igen nagy sikerű *Encyclopädie der mathematischen Wissenschaften* 5. kötete 13. és 14. füzetében megjelent cikkét, amelyek 1904. június 16-án láttak napvilágot [14]. Az *Annalen der Physik* több cikkében és az *Encyclopädie*-ben sokszor idézik a jubileumi Lorentz-kiadványt [15], valamint Wien és Cohn könyveit. Ez utóbbiakból az ugyancsak többször idézett „Das elektromagnetische Feld” címűt választottam ki részletesebb vizsgálatra.

A következőkben összeállítom azt a képet, amelyet Einstein ez íráskor olvasván alkothatott magának a klasszikus elektrodinamikáról és az elektronelmületről.

### Ismerkedés a klasszikus elektrodinamikával

Az Einstein által felsorolt fizikusok között Helmholtz és Hertz adhatott a legtöbbet Einsteinnek. Igaz, *Kirchhoff* nagy tankönyvének [16] 3. kötetében említi Faraday és Maxwell elméletét, de az elektrodinamikát, német szokás szerint, potenciálméleti, távolhatási felfogásban tárgyalja, ami teljesen idegen Einstein későbbi gondolataitól. (Annál többet találkoztunk Einstein nem-relativisztikus cikkeiben Kirchhoff könyve első kötetével, a *Mechanikával*.)

*Helmholtz*nak az elektrodinamika fejlődésével foglalkozó írásai egyetlen gondolatsort alkotnak [17]. Megmutatja bennük, hogy F. E. Neumann, Maxwell, Weber



és K. Neumann elmélete zárt áramkörre azonosan írja le az energetikai viszonyokat, a nyitott áramkör tárgyalásánál azonban Weber és K. Neumann elmélete következetlennek bizonyul; Maxwell és F. E. Neumann között viszont csak újabb kísérletekkel lehetne dönteni. Az utolsónak említett cikkben számol be Helmholtz arról a kísérletről, amelynek magyarázatára Neumann potenciálméletét ki kell egészíteni Faraday és Maxwell azon követelményével, hogy nincsenek nyitott áramkörök, minden áramkör zárt. Végeredményben Helmholtz arra a következtetésre jut, hogy a kísérleti tények a legteljesebben Maxwell elméletével magyarázhatók.

Amikor Einstein a Lorentz munkássága kezdetén uralkodó elektrodinamikai nézetekről azt írta, hogy ezekről „Heinrich Hertznek a mozgó testek elektrodinamikájával foglalkozó munkájának tanulmányozásával kaphatunk pontos képet” [18], e személytelen kijelentéssel bizonyára személyes élményét fejezte ki.

Hertz ebben a cikkében [19], mint majdnem minden munkájában, Helmholtzból indul ki, az ő jelölésével építi föl elméletét. Alapfeltevése: a testek magukkal viszik a beléjük zárt étert. Ez összhangban van az elektromágneses kísérletekkel, de ellentmond Fizeau és Airy optikai kísérleteinek, amelyek megkövetelik, hogy a testek csak részlegesen sodorják magukkal az étert.

Amint Hertz írja, a mozgó testekre felírt elektrodinamikai egyenleteknél:

$$\begin{aligned} A \left\{ \frac{d\Omega}{dt} + \frac{d}{dy} (\beta\Omega - \alpha\mathfrak{M}) - \frac{d}{dz} (\alpha\mathfrak{R} - \gamma\Omega) + \alpha \left( \frac{d\Omega}{dx} + \frac{d\mathfrak{M}}{dy} + \frac{d\mathfrak{R}}{dz} \right) \right\} &= \frac{dZ}{dy} - \frac{dY}{dz} \\ \vdots & \\ A \left\{ \frac{d\mathfrak{X}}{dt} + \frac{d}{dy} (\beta\mathfrak{X} - \alpha\mathfrak{Y}) - \frac{d}{dz} (\alpha\mathfrak{Z} - \gamma\mathfrak{X}) + \alpha \left( \frac{d\mathfrak{X}}{dx} + \frac{d\mathfrak{Y}}{dy} + \frac{d\mathfrak{Z}}{dz} \right) \right\} &= \frac{dM}{dz} - \frac{dN}{dy} - 4\pi\beta u, \\ \vdots & \end{aligned}$$

a hagyományosan gondolkodók „a baloldali polarizációváltozási sebességet oknak, a jobboldali indukált erőt következménynek tekintik”. Az elektromotoros erő azonban nemcsak az erőterek időbeli változásától függ, hanem más tagoktól is. A hagyományos interpretáció „ezeket az összeadandókat, elektrosztatikus vagy mágneses erőként ... egyenleteinkkel együtt meghatározott elektrodinamikai erővel állítja szembe” [20]. Hertz ellenzi ezt a felfogást, nem fogadja el az oksági összekapcsolást. Az elektromotoros erő parciális erőkre való szétforgácsolásának ezt az ellenzését, egységes erőként való felfogását Einstein cikke 2. pontban említett gondolata előzményének tartom.

E cikkben kívül Einstein olvashatta Hertz másik, nagy jelentőségű munkáját is, amelyben egyszerűsítette, logikusabbá tette Maxwell elméletét, kiküszöbölte vagy elhagyta mindazon elemeit, amelyeket nem értett, vagy a jelenségekre hatással nem voltak [21]. A Maxwell-elmélet, akár magának Maxwellnek műveiben kifejtve, akár Helmholtz elmélete határesetének tekintve, akár pedig Hertz felfogásában tárgyalva, mind csak különféle alakja ugyanannak a tartalomnak, amely nem más — írja Hertz —, mint a Maxwell-egyenletek rendszere [22]. Nála tehát szintézisbe olvad az angol közelhatási és a német távolhatási — potenciálméleti elektrodinamika. Ez a szintetikus jellege, az a vonása, hogy Maxwell elméletét a német fizika hagyományaival kötötte össze, még inkább indokolja, miért fordulhatott Hertzhez a fiatal Einstein, amikor Maxwelllel akart ismerkedni. Hertzben olyan tanítóra lelt, aki egyetemi tanulmányaihoz és eddigi képzettségéhez szorosan kapcsolódva

ismertette meg Maxwellnek nemcsak Hertz, de Boltzmann által is bonyolultnak ítélt elméletével.

Szembetűnő, mennyire hasonlít Hertz és Einstein nyugvó rendszerre felírt Maxwell-egyenletrendszere, jelölésmódja, s mennyire eltér ettől a többieké (lásd az I. táblázatot). Einstein egyébként 1907-ig minden cikkében Maxwell—Hertz-egyenleteknek nevezi az elektrodinamika alapegyenleteit.

# I. TÁBLÁZAT

Elektrodinamikai jelölések a századforduló körül

	Boltzmann	Helmholtz	Föppl	Lorentz	Hertz	Einstein
fénysebesség	$\mathfrak{B}, V$	$\frac{1}{A}$	$v$	$V$	$A$	$V$
koordináta-rendszer iránya	jobb	bal	jobb	jobb	jobb	jobb
elektromos térerősség	$\mathfrak{E}$ $P, Q, R$	—	$\mathfrak{E}$	$\mathfrak{E}$	$X, Y, Z$	$X, Y, Z$
mágneses térerősség	$\mathfrak{S}$ $\alpha, \beta, \gamma$	—	$\mathfrak{S}$	$\mathfrak{S}$	$L, M, N$	$L, M, N$
áramerősség	$u, v, w$	$u, v, w$	$i$	—	—	$u_x, u_y, u_z$
az egységnyi elektromos töltés neve	—	freie Elektrizität	freie Elektrizitäts-menge	Ion	Einheitspol	Einheitspol

*Boltzmannnak* igen nagy érdemei vannak a Maxwell-elmélet s általában az angol fizika németországi népszerűsítésében. Maxwell elméletét előadásában igen vonzóan fejtegeti [23]. Gyakran hivatkozik Helmholtzra és Hertzre. Mindkét kötet végén gazdag bibliográfia található a tanulmányozásra ajánlott művekből.

A. Föppl említett [9] könyve Maxwell elméletét sajátos módon ismerteti. Először is a vektorjelölést és -számítást használja, ellentétben Helmholtz-cal, Hertz-cel és Einstein-nal. A mozgó vezető elektrodinamikáját a relatív és az abszolút mozgás elemzésével kezdi, s a következő kérdést teszi föl: „Nem tekinthetjük a priori helyesnek, hogy pl. közömbös, hogy a mágnes mozog-e nyugvó áramkör közelében, vagy ez utóbbi mozog, míg a mágnes nyugszik, hacsak nem ugyanakkora a relatív mozgásuk mindkét esetben” [24]. A kérdés tehát szónoki. Föppl a következőkben meg is mutatja, hogy ez az aszimmetria nem lép föl, ennek ellenére Föpplnek ezt a kérdését tartja Holton Einstein kezdő (1.) gondolata egyetlen előzményének. Föppl azonban rámutat egy hasonló problémára. Ha egy vezető körül a mágneses tér erősségét a mágnes mozgásával változtatjuk, más kifejezést kapunk az indukált elektromotoros erőre, mintha e változást nyugvó tekercssel, az áramerősség változtatásával idéztük volna elő, pedig a Maxwell-elmélet alapfelfogása szerint az erőter valamely pontban gyakorolt hatását csak a pont közvetlen környezetében uralkodó térerősség határozza meg, s nem azok a távoli okok, amelyek miatt e pont körül az erőter változik [25]. Ennek az aszimmetriának az az oka, hogy Föppl a vezetőt „kevert rendszernek” tekintette, amelyben ún. csúszási helyek vannak, ezeken az erővonalak szakadása virtuális elektromos töltésként jelentkezik, s mozgásuk elektrosztatikus fluxust jelent.



Hertz — de nemcsak ő, hanem valamennyi kortársa — e témáról pontosan fordítva okoskodik: ha a vezető és a mágnes relatív mozgása ugyanaz, ugyanannak a hatásnak kell fellépnie, bármelyik mozog. Elegendő tehát az egyik esettel foglalkoznunk, ugyanazt az eredményt tarthatjuk érvényesnek a másikra is. Egyébként Hertz ismeri a Föppl által felvetett problémát, de ő kiköti, hogy a csúszási helyeken fellépő elektromotoros erőtől eltekint [26].

Föppl az indukció tárgyalásánál felveti azt a kérdést, mihez viszonyítsuk a mágnes mozgását, amikor az általa indukált elektromotoros erőre vagyunk kíváncsiak. A válasz attól függ, magával viszi-e a mozgó ponderábilis anyag a benne levő és körülötte levő étert, vagy sem. Ha magával viszi, akkor a mágnes mozgása nem indukál elektromos erőt, az éterben, ha nem viszi magával, indukál. Ahol pedig az éternek a mágneshez viszonyított sebessége 0 és a mágnes (abszolút) sebessége között van, az elektromos erőter értéke is ennek megfelelően változik.

Melyik tehát az elektromos erőter, illetve — vezetőnél — az elektromotoros erő „igazi” értéke? — merülhetett föl a kortársban a kérdés. A válasz kétféle lehetett: vagy csak egy ilyen érték van, vagy minden érték „igazi”. Az első lehetőséget az biztosítaná, ha a testekkel együtt mozgó vagy nem mozgó éterfelhők nem is léteznének, s egyetlen mozgási állapotban (pl. „nyugalomban”) levő éterre építenének föl elektrodinamikát; a másik lehetőséget pedig az, ha az éter fogalmát teljesen eldobnák. Az első megoldást Lorentz, a másodikat — a következőkben szóba jövő elődök nyomán — Einstein választotta.

### Ismerkedés az elektronelmélettel

„Ami engem illet — írta Einstein Seelignek 1955. február 19-én —, csak Lorentz 1895-ös jelentős munkáját ismertem (1905 előtt), későbbi műveit nem ...” [27]. Born az idézetet e mű címével kiegészítve közli, különös módon azonban két címet is említ: a Versucht [28] és a La théorie électrodynamique du Maxwell-t [29], habár ez utóbbi 1892-ben jelent meg. Így a következőkben csak a Versucht tekintem bizonyítottan olvasottnak.

Lorentz a Földdel együtt  $p$  sebességgel mozgó (a Földhöz képest nyugvó) koordinátarendszerben  $v$  sebességű anyagi rendszer elektrodinamikai alapegyenleteit oly módon írja föl, hogy a nyugvó rendszerre vonatkozó alapegyenletekben szereplő idő szerinti deriválást a következővel helyettesíti:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_1 = \frac{\partial}{\partial t} - p_x \frac{\partial}{\partial x} - p_y \frac{\partial}{\partial y} - p_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (v = 0).$$

Az így kapott egyenletekből levezeti a Földhöz képest nyugvó ionokra (elektronokra) ható erőt, s a skaláris potenciálra (amelyet nyugvó rendszerben  $\Delta\omega = 4\pi\rho$ ,  $\mathfrak{D} = -\frac{1}{4\pi}$  grad  $\omega$  definiál), a következő kifejezést kapja:

$$\left(1 - \frac{p^2}{V^2}\right) \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} = \rho,$$

$V$  a fénysebesség,  $\rho$  a töltéssűrűség,  $p$  párhuzamos az  $X$ -tengellyel.



Ahhoz, hogy ezt az egyenletet nyugvó rendszerbeli alakjára hozhassa,  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$  koordinátákkal olyan vonatkoztatási rendszert vezet be, amely nyugszik, és  $X$  irányában  $\sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}}$  arányban meg van nyúlva, azaz, ha a mozgó rendszerhez viszonyított (relatív) koordinátákat  $x$ ,  $y$ ,  $z$ -vel jelöljük, az

$$x = x' \sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}}, \quad y = y', \quad z = z'$$

egyenletek határozzák meg. Mivel Lorentz szerint

$$\varrho' = \varrho \sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}},$$

tehát

$$\frac{\partial^2 \omega'}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 \omega'}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2 \omega'}{\partial z'^2} = \varrho' = \varrho \sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}}.$$

Nyugvó rendszerben

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} = \varrho,$$

tehát

$$\omega = \frac{\omega'}{\sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}}},$$

s így az elektromos erőter új rendszerre vonatkozó komponensei:

$$\mathfrak{E}_x = \mathfrak{E}'_x, \quad \mathfrak{E}_y = \sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}} \mathfrak{E}'_y, \quad \mathfrak{E}_z = \sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}} \mathfrak{E}'_z.$$

A mozgás következtében tehát az ionokra ható erő  $\frac{p}{V}$ -ben másodrendben megváltozik, az elektrosztatikus rendszer a mozgás irányában  $\sqrt{1 - \frac{p^2}{V^2}}$  arányban összehúzódik, s ebből meg lehet állapítani a Föld sebességét, ám ezt a nagyon kicsi hatást nem lehet megfigyelni.

Lorentz ennek az eredménynek a Michelson—Morley-kísérlet értelmezésénél veszi hasznát. A kontrakciós hipotézist ugyanis úgy teszi elméletileg valószínűvé, hogy feltételezi: a molekuláris erő is az éter hordozza, s így a transláció talán éppúgy befolyásolja két molekula távolságát, mint két ionét [30].

Lorentz a mozgó testek optikájának tárgyalását azzal kezdi, hogy az alapegyenletekben elhanyagolja a  $\frac{p}{V}$ -ben másodrendű tagokat, így tehát minden további eredménye elsőrendben lesz igaz. Az egyenletek egyszerűsítésére  $t$  helyett bevezeti a  $t' = t - \frac{p_x}{v^2}x - \frac{p_y}{v^2}y - \frac{p_z}{v^2}z$  kifejezést, amelyet „időnek tekinthetünk, s az illető pont helyétől függő időpillanattól számítunk. Emiatt ezt a változót  $e$  pont helyi idejének nevezhetjük, szembeállítva az általános idővel” [31].

Ez a  $t'$  csodaszernek bizonyul. Segítségével az alapmennyiségek úgy transzformálhatók át mozgó rendszerből nyugvóba, hogy alakjukat megtartják, s így a mozgó testek optikáját vissza lehet vezetni a nyugvó testek optikájára.

„Ha ugyanis ismert nyugvó testek egy rendszerének mozgásállapota, amelynél  $\mathfrak{D}_x, \mathfrak{D}_y, \mathfrak{D}_z, \mathfrak{E}_x, \mathfrak{E}_y, \mathfrak{E}_z, \mathfrak{H}_x, \mathfrak{H}_y, \mathfrak{H}_z$  az  $x, y, z$ , és  $t$  bizonyos függvénye, akkor lehetséges ugyanebben a rendszerben, ha  $p$  sebességgel mozog, olyan mozgásállapot, amelynél  $\mathfrak{D}'_x, \mathfrak{D}'_y, \mathfrak{D}'_z, \mathfrak{E}'_x, \mathfrak{E}'_y, \mathfrak{E}'_z, \mathfrak{H}'_x, \mathfrak{H}'_y, \mathfrak{H}'_z$  ugyanilyen függvénye  $x, y, z$  és  $t'$ -nek (azaz  $t - \frac{1}{v^2} (p_x x + p_y y + p_z z)$ -nek) ... Ez a megfeleltetés — jegyzi meg Lorentz — módot

ad arra, hogy a földmozgás optikai jelenségekre gyakorolt hatásának kérdéseit egyszerűen kezelhessük” [32]. E fejezet címe egyébként „Visszavezetés nyugvó rendszerre.” Állítsuk a tétel és a fejezetcím mellé Einstein cikkének következő mondatát, amely, mint látni fogjuk, cikke lényege: „Az itt használt módszerrel (a később Lorentzről elnevezett transzformáció alkalmazásáról beszél) a mozgó testek optikájának minden problémája megoldható. A lényeg a dologban az, hogy a mozgó test által befolyásolt fény elektromos és mágneses térerősségét a testhez viszonyítva nyugvó koordinátarendszerre transzformáljuk. Ezzel a mozgó testek optikájának minden problémája a nyugvó testek optikájának problémáira vezethető vissza.” [3] Lorentz a tételben szereplő mozgási állapotokat „megfelelkező állapotoknak” (korrespondierende Zustände) nevezi, ezen állapotok egyenrangúsága tehát a relativitási elv első,  $v/c$ -ben elsőrendben és elektrosztatikus rendszerre igaz alakja.

Mit ért Lorentz nyugvó rendszeren, nyugvó testen? „Hogy az éter *abszolút* nyugalmaról beszélni sem lehet, magától értetődik; magának a kifejezésnek sincs értelme. Amikor a rövidség kedvéért azt mondom, hogy az éter nyugszik, ezen csak azt akarom érteni, hogy e közeg egyik része sem mozdul el a másikhoz képest, és hogy az égitestek minden megfigyelhető mozgása az éterhez viszonyított relatív mozgás.” [33] Az „abszolút” nyugalomnak ezzel a felfogásával Lorentz nem áll egyedül; további példával a következőkben még találkozunk.

Lorentz elektronelmélete a század elejére már világhíressé vált. Az étert nyugalomra ítélte, az elektromágneses kölcsönhatás megfigyelhető jelenségeit pedig az elektromosság atomjainak tekintett elektronokra (ionokra) ruházta. Ezzel megteremtette annak a lehetőségét, hogy egyrészt az elektronokat az anyag (a ponderábilis anyag) építőköveinek, sőt, az éter módosulatának, szingularitásának tekintsék, másrészt, hogy az éter, éppen e teljes passzivitása miatt, beleolvadjon a térbe, s az elektromágneses hullámok önállóan létező erőtérré lépjenek elő.

Az első lehetőséget az elektromágneses világfelfogás aknáztta ki, amelyet tehát az jellemez, hogy nem az elektromágnességet akarja mechanikailag megalapozni, hanem fordítva, a mechanikát akarja elektromágneses alapra helyezni.

Ez az irányzat egyrészt a Versuchból indult ki, amelyben Lorentz — mint láttuk — a mozgó testek méretváltozását azzal indokolta, hogy a molekuláris erő az elektrosztatikus erőhöz hasonlóan viselkedik, másrészt Lorentznek abból a megállapításából, hogy az elektronnak kétféle tömege lehetséges: a látszólagos és a valódi [34].

Ez utóbbi állítás kísérleti ellenőrzése során *Kaufmann* katódsugarak elektromágneses térben történő elhajlását mérte, adatait pedig *M. Abraham* interpretálta úgy, hogy a mozgó elektron elektromágneses tömege (az önindukcióból származó ellen-



állása a mozgással szemben) úgy változik a sebességgel, mint az elhajlásból számítható látszólagos tömege, tehát ha van is az elektron tömegének nem elektromágneses összetevője, az csak elhanyagolható nagyságú lehet [35]. Abraham ebből arra a meggyőződésre jutott, hogy az elektronnak csak elektromágneses tömege van [36]. A hossz-irányú és keresztirányú tömeg megkülönböztettségét pedig így fogalmazta meg: az elektron tömege nem skaláris, hanem forgásszimmetrikus tenzor.

Abraham és Lorentz elmélete abban különbözik egymástól, hogy míg Lorentz nem tartotta lehetetlennek, hogy a kontrakció az elektronra magára is érvényes, ezt Abraham visszautasította, mivel szerinte e deformáció az elektronon belüli nem elektromágneses rugalmassági erő létezését tételezné föl, ami ellentmond a tiszta elektromágneses világfelfogásnak. Abraham a kontrakciót csak makroszkópikus tömegekre értette, a Lorentz-elméletet viszont felhasználta arra, hogy megmagyarázzon olyan jelenségeket, amelyeket saját elméletével képtelen lett volna. A Lorentz-transzformáció általános jelentőségét nem ismerte föl, pedig ez arra kényszerítette volna, hogy elvesse a kitüntetett rendszer fogalmát. Ebben egyetérték S. Goldberggel [37]. Abban azonban már nem, hogy Abrahamot — szerinte — ebben az abszolút éterbe vetett megrendíthetetlen hite gátolta. Abraham ugyanis, legalább is ebben az időben, nem vette komolyabban az étert, mint sok kortársa. „... az «éter» szót csupán a ponderábilis testek nélküli térben lefolyó elektromágneses és optikai folyamatok összességének rövid jelölésére vezetjük be ... Ez a felfogás ... a térnek, mint olyannak, fizikai tulajdonságokat tulajdonít” [38].

Abraham a nyugvó koordináta-rendszerhez ragaszkodik, mivel ezt követelik meg az elektromágnesség alapegyenletei: azok szerint ugyanis gyors mozgásnál a síkhullámok izotrop terjednek, kell tehát valamilyen vonatkoztatási rendszernek lennie, amely értelmet ad az izotrópiának. Lassú mozgásokra alkalmazható Hertz elmélete (amely, mint láttuk, „relatív” elmélet), csupán ritkított gázokban lép föl probléma: az elmélet szerint ugyanis ezeknek is magukkal kell vinniök az erőteret, bármilyen ritkák, s így végül az éternek olyan tulajdonságokat kell tulajdonítanunk, mint a ponderábilis anyagnak, így tehetetlenséget is. Így marad érvényben a mechanikai energiamegmaradás (a tehetetlen éterrészek felveszik a mozgásmennyiség egy részét), és érvényben marad a relatív mozgás axiómája is (ezt a Föld abszolút mozgásának megállapítására tett kísérletek támasztják alá és követelik meg). Mindezt, ismétlem, lassú mozgásnál igaz.

A gyors mozgásnál már a transláció is nyugvó rendszert követel, ellentétben a mechanikával, amelyben csak a forgás (Foucault-inga) utal abszolút nyugalomra. Emiatt Abraham szerint az elektromágnesség egységesebb elmélet, mint a mechanika, tehát inkább erre kell alapozni a mechanikát, és nem fordítva.

Érdemes kissé részletesebben megismerni Abraham arra vonatkozó elképzelésével, miért nem mutatható ki a transláció lassú mozgásoknál. Elvileg úgy lehetne pl. a Föld translációjának sebességét megmérni, hogy megmérnénk a fény terjedési sebességét. Egy bizonyos távolságot ugyanis nyugvó rendszerben nem annyi idő alatt tenne meg, mint mozgóban. Ámde a távoli órákat optikai vagy elektromos jelekkel lehet a legpontosabban beállítani e sebesség megméréséhez, például úgy, hogy  $O$  pontból fényjelet küldünk  $P$ -be, s az ott levő megfigyelő az  $OP$  távolság és a fénysebesség ismeretében kiszámíthatja, hogyan állítsa be óráját, hogy szinkron járjon az  $O$ -ban levővel. Ehhez természetesen a fénysebességet izotropnak kell feltételezni, ami nyugvó rendszerben Abraham szerint igaz, mozgó rendszerben nem. Mégis, „ha az  $O$ -ban és  $P$ -ben levő órákat a fent részletezett módon vetjük egybe,



ezzel a rendszer mozgását figyelmen kívül hagyhatjuk, s így azt tapasztaljuk, mintha a fény relatív sebessége most is független lenne az iránytól, mégpedig  $c$  lenne”. Az így meghatározott időt Lorentz-cel helyi időnek nevezhetjük. Mivel pedig az elektromágneses világfelfogás szerint a mechanikai erők sem idézhetnek elő más változást, mint az elektromágnesesek (hiszen azok is emezekre vezethetők vissza), a Föld abszolút mozgása semmilyen körülmények közt sem mutatható ki [39].

Ha ez a könyv nem került volna Einstein kezébe 1905 júniusáig (cikke ugyanis június 30-án érkezett az *Annalen der Physik* szerkesztőségébe), a távoli órák fényjelekkel történő szinkronizálásával a jubileumi Lorentz-kötet Poincarétól származó cikkében is találkozhatott. *Poincaré* is azzal magyarázza a Föld abszolút mozgásának kimutathatatlanágát, amivel Abraham: „Feltételezem, hogy a különböző pontokban elhelyezkedő megfigyelők fényjelekkel állítják be órájukat; hogy helyesbíteni akarják a jeleket a terjedési idővel, de nem veszik tekintetbe azt a transzlációs mozgást, amelyben vannak, s emiatt úgy vélik, e jelek mindkét irányban egyenlő sebességgel terjednek, s hogy korlátozzák megfigyeléseik egymást keresztező hatását, jelet küldenek  $A$ -ból  $B$ -be, majd másikat  $B$ -ből  $A$ -ba. A  $t'$  helyi idő az így beállított órák által mutatott idő” [40]. Nyilvánvaló, hogy Abraham Poincaré gondolatait ismételte meg.

Lorentz és Abraham elektronelmélete mellé harmadikkal *Bucherer* csatlakozott. Szerinte, ha Abraham szilárd elektronjától eltekintünk, s az elektronban térbeli töltéseloszlást tételezünk föl, csak egy lehetőségünk marad: az elektron úgy változtatja alakját mozgás hatására, hogy térfogata állandó marad. Az e föltevés-sel kapott keresztirányú tömeg sem mond ellent Kaufmann kísérleteinek (ennek egyébként Lorentzé sem mondott ellent). *Bucherer* e könyve 1904-ben jelent meg [41], s bár a *Bucherer*-féle elektronmodellt Einstein csak két év múlva említette [42], valószínű, hogy már 1904-ben olvasta. *Bucherer* egyébként nem kifejezett híve az elektromágneses világfelfogásnak, előnyben részesíti a fenomenologikus leírást. Erről később még beszélünk.

*W. Wien* Lorentz Versuchjából és későbbi cikkeiből kiindulva jutott el az elektromágneses világfelfogáshoz. Az időben sokat idézett cikkében [43] a Hertz Mechanikájában kitűzött feladat fordítottját hirdeti meg: miként lehet elektrodinamikai alapra helyezni a mechanikát, majd Lorentz ötletét folytatva, a gravitációt. Cikkének jelentőségét két kijelentésében látom: 1. elsőnek állítja, hogy a mechanika nem alkalmas az elektromágneses jelenségek leírására, s hogy 2. véleménye egyenértékű azzal a felfogással, hogy mind az anyag, mind az elektromosság atomisztikus. Ez utóbbinak filozófiai jelentősége van: ellentmond Mach az időben még meglevő atomellenességének.

Az első kijelentés Poincarétól indult ki [40]. Ő hívta föl először a figyelmet arra, hogy a Lorentz-elméletben az elektron és az éter kölcsönhatásánál nem érvényesül a hatás—ellenhatás elve. Megmutatja, hogy ez az elv az energiamegmaradás és a relatív mozgás elvének következménye, s hogyha az energiamegmaradásban nem kételkedünk, a relatív mozgás elvének kell megsérülnie ahhoz, hogy a hatás—ellenhatás kimutatott érvénytelensége fennálljon. E logikai szükségszerűséget azonban a kísérleti tények „nem tisztelték”, ezért fejezte ki Poincaré csodálkozását azon, hogy a Föld abszolút sebességét nem lehet megállapítani, ezért keresett kiutat abban az irányban, hogy igenis feltételezze a várt hatást, de lehetőleg pontosan kompenzáló ellenhatást is találjon. Ilyen kompenzálás a kontrakció, a helyi idő. Segítségükkel megmutatja, hogy amikor egy fényforrás mozog, helyi időben számítva az energiaki-bocsátás időtartamát s így az energia mennyiségét, nyugvó rendszerre megkapja azt a

munkát, amelyet a kisugárzás visszalökő ereje a forráson végez, azaz a hatás—ellenhatás törvényét. Így ez a törvény nem az anyagra (elektronokra), hanem az anyag és az elektromágneses energia együttes rendszerére igaz, s mindezt — amint láttuk — a helyi idő használatával éri el.

Poincaré e cikkében találjuk az első példát arra, hogy a relatív mozgás elvét, mint heurisztikus elvet alkalmazzák. Tény, hogy ez nem a relativitási elv; a hangsúly a módszeren van.

Térjünk vissza Wien azon állításához, hogy az elektromágneses világfelfogás lényegében atomisztikus. Ez szemet szúrhatott Machnak és híveinek. Ennek bizonyítására ismerkedjünk meg *E. Cohn* álláspontjával [44]. Cohn megállapítja, hogy míg az elektromos jelenségek csak a relatív mozgástól függenek (ezt a függőséget a Faraday-féle indukciós törvény fogalmazza meg), az optikai jelenségeknél ez nem mindig van így. Az ide tartozó kísérleti tények a következők: az aberráció, a Fizeau-féle fénysebességmérés áramló vízben, az aberráció függetlensége a távcsőben levő optikai közegtől, végül a Michelson—Morley-féle kísérlet negatív eredménye.

Ezután Cohn kitűzi a feladatot: úgy kell megváltoztatni a Maxwell-egyenleteket, hogy e tényeket megmagyarázzák. Ez pozitivista program: nem mélyebben fekvő alapokat keres (elektronok), hanem fenomenologikus elméletet akar illeszteni a jelenségekhez. Két elmélet versengett eddig egymással: Hertzé és Lorentzé. Hertz elmélete megmagyarázta az aberrációnak a közegtől való függetlenségét és a Michelson-kísérletet, ellentmondott azonban az aberrációnak és a Fizeau-kísérletnek. Lorentz elmélete valamennyi tényről számot tud adni, de  $v/c$ -ben csak első rendben, ez viszont ellentmond a speciálisan másodrendű Michelson-kísérletnek. A Maxwell-egyenleteket tehát úgy kell megváltoztatni, hogy első rendben Lorentz elméletével egyezzenek meg, másodrendben pedig biztosítsák, hogy a tetszés szerinti magába záruló görbe mentén haladó fénysugár optikai úthosszát a mozgás ne befolyásolja. Relatív koordinátákban felírva (relatív, illetve abszolúton azt érti, hogy a jelenséget arra a térre vonatkoztatjuk-e, amely együtt mozog vele, vagy sem) az alábbi egyenleteket javasolja:

$$P(M) = \frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial t}; \quad \mathfrak{E} = \varepsilon E - \varepsilon_0 \mu_0 [uM],$$

$$P(E) = \frac{\partial \mathfrak{M}}{\partial t}; \quad \mathfrak{M} = \mu M + \varepsilon_0 \mu_0 [uE],$$

$$\Gamma(\mathfrak{E}) = 0,$$

$$\Gamma(\mathfrak{M}) = 0,$$

ahol  $E$  és  $M$  az elektromos, illetve a mágneses térerősség,  
 $\varepsilon$  és  $\mu$  a dielektromos állandó, illetve a mágneses szuszceptibilitás, az adott közegben,  
 $\varepsilon_0$  és  $\mu_0$  ugyanaz, vákuumban,  
 $u$  a test állandó sebessége,

$$P(A) = \text{rot } A,$$

$$\Gamma(A) = \text{div } A.$$

Cohn megmutatja, hogy ezekkel az egyenletekkel valamennyi kísérleti eredmény megmagyarázható.



E cikk gondolatait 1902-ben folytatja [45]. Szempontunkból különösen az érdekes, mit ért éteren: „Maxwell és Hertz módján egy kémiaiilag és fizikailag homogén közeget használunk, olyan képződményként, amelyet néhány állandó teljesen meghatároz. Egy ilyen közeg betölti terünk minden elemét; határozott ponderábilis anyag vagy akár a vákuum is lehet. Ezen kívül még valami «éterről» nem fogunk beszélni ... azt kutatjuk, miként lehet mennél több tapasztalati tényt mennél kevesebb elméleti föltevessel figyelembe venni” [46].

Cohnnál találtam a második utalást az indukció elméleti aszimmetriájára. A Faraday-féle indukciónál a mágnes mozgása indukálja az elektromotoros erőt a nyugvó vezetőben — ezt Cohn az alapegyenleteknél tisztázza. A mozgó testek elektrodinamikájánál viszont, abban a speciális esetben, amikor a vezető mozog nyugvó mágneshez képest, csak mechanikai munkáról lehet szó [47]. Ebből azonban nem következtet arra, hogy ebben az elmélet gyöngesége mutatkoznék meg.

Cohn elméletét maga Lorentz vetette egybe a sajátjával [48], s megállapította, hogy míg  $v/c$ -ben első rendben a két elmélet valóban azonos eredményre vezet, a Michelson—Morley-féle kísérlet megmagyarázására ő a kontrakciót tételezi föl, Cohn pedig azt, hogy mivel a kísérletet levegőben folytatták le, a levegőmolekulák optikai hatása kompenzálta a fellépő pozitív hatást. Bár Lorentz nem tudott alapvető kifogást találni Cohn elméletében, frappáns példán mutatta be ki nem elégtő voltát. A  $v$  sebességgel mozgó dielektrikumban a mozgás irányában terjedő fénysugár sebessége Cohn szerint, nyugvó rendszerben:

$$c' = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} + \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right)v + \frac{1}{\epsilon\sqrt{\epsilon}} \frac{v^2}{c^2}.$$

A második tagban a Fresnel-féle sodrási együttható szerepel; ez arra mutat, hogy nem minden vesz részt a translációban, ami a levegőben töltött térben van, így van alap arra, hogy különbséget tegyünk éter és ponderábilis anyag között. Ha pedig ez így van, nem valószínű, hogy éppen a Fresnel-együtthatónak kell szerepelnie, ha nem tételezzük fel, hogy az éter nyugszik. Ha viszont ezt tételeznénk föl, a harmadik tag helyett kellene olyan tag, amely a levegő ritkulásával 0-hoz tartana.

Abraham és Cohn között áll Bucherer 1903-as cikkével, amelyben a relativisztikus felfogás terjedéséről tesz említést: Nordmeyer kísérletei „úgy tűnik, további alapot adnak annak a mindinkább érvényre jutó felismerésnek, hogy az elektromos és mágneses, valamint a sugárzási jelenségeket csak akkor befolyásolja valami, ha anyag mozog anyaghoz képest” [49]. Ebben ugyan nehézséget lát (azt ugyanis, hogy az éter kiküszöbölésével egyszersmind az elektromágneses hatás időbeli terjedését is el kellene vetnünk), de előnyt is: azt, hogy az anyag visszakaphatná azokat a tulajdonságait, amelyeket mesterségesen elvettek tőle, s az éternek adtak; így a dualisztikus felfogást monisztikus váltaná föl.

Annak, hogy csak anyaghoz viszonyított mozgás okoz változást, az lenne Bucherer szerint a további következménye, hogy a minden más testtől távoli töltött test nem vinné magával erőterét, s a vele együtt mozgó megfigyelő — ezen nem anyagi vonatkoztatási rendszert ért, hanem hipotetikus, anyagtalán megfigyelőt — sem elektromágneses erőteret, sem energiaváltozást nem érzékelhetne, sőt az elektron elektromágneses tömegének sem lenne értelme. Einstein következő kitétele jut erről eszembe: „... az elektromos és mágneses térerősség a koordinátarendszer mozgásállapotától nem független” [5].



Bucherer ekkor még nem tette meg azt a lépést, amelyet Cohn: hogy az éter helyett önálló létezését tulajdonítson az elektromágneses erőternek; ezzel ugyanis eloszlathatta volna kételyét, hogy miként terjedhet időben az elektromágneses hatás éter nélkül. Már idézett 1904-es könyvében már határozottabb: elismeri, mekkora szolgálatot tett az éter az elektrodinamikának, de a továbbfejlődés zálogát az éter elvetésében látja. Ezzel — úgy véli — a mozgással járó alakváltozás bonyolult kérdései is tárgyaltanná válnak. Azt javasolja, hogy minden zárt, transzlációban levő rendszerben általában legyen igaz, hogy

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t},$$

s hogy bármely vektor idő szerinti deriváltja legyen 0. Ezzel Lorentz megfelelő állapota azonosakká válnak. Tetszőleges mozgásnál azonban természetesen fennállhatnak dinamikai hatások. Bucherer e javaslata „teljes összhangban lenne H. Hertz azon jól ismert megjegyzésével, amely tisztán fenomenologikus eljárást ajánl — *miután* célszerű képekkel (éter, I. J.) megismertük a törvényszerűségeket” [50].

### Einstein útja a speciális relativitáselmélethez

Ezt az utat az előző fejezetekben összegyűjtött adatokból és Einstein további nyilatkozataiból próbálom meg összeállítani.

„Ha egy fénysugarat fénysebességgel tudnék követni, akkor ezt nyugvó, térben oszcilláló elektromágneses erőternek érzékelném — írja Önéletrajzában Einstein. — Ez azonban sem a tapasztalat, sem a Maxwell-egyenletek alapján nem tűnik valószínűnek. Intuitíve már eleve világosan láttam, hogy ilyen megfigyelő mindent ugyanazon törvények szerint lát lejátszódni, mint a Földhöz képest nyugvó megfigyelő. Ekkor viszont miből tudja, honnan állapítja meg az első megfigyelő, hogy gyors, egyenletes mozgásban van?

Látható, hogy e paradoxon már tartalmazza a speciális relativitáselmélet csíráját” [51].

E gondolat 16 éves korában, aarai gimnáziumi évében született meg benne, 1895-ben, azaz pontosan 10 évvel 1905 előtt [52]. Hasonló gondolattal találkoztam Maxwellnak az Encyclopaedia Britannicába írt „Éter” cikkében: „... a fény, tudjuk, bizonyos sebességgel terjed ... Ha tehát feltesszük, hogy egy pont a sugár mentén e sebességgel halad, azt találjuk, hogy ugyanaz a folyamat játszódik le a sugár minden pontjában, amint a mozgó pont melléér” [53]. E meglepő hasonlóságot azonban eddig nem sikerült életrajzilag megmagyaráznom; valószínűleg véletlennel állunk szemben.

Einstein másik nyilatkozata az előbbi paradoxon konkrétabb megfogalmazása: „Ami többé-kevésbé közvetlenül a speciális relativitáshoz vezetett, az az a meggyőződésem volt, hogy mágneses erőterben mozgó testre ható elektromotoros erő nem más, mint elektromos erőter” [54]. Ennek előzményét Hertznel találtuk meg.

A Maxwell-elmélet korlátaira más oldalról a hatáskvantum 1900-ban történt felfedezése mutatott rá. Planck eredménye nagy hatást tett Einsteinre, s ezekben az években, mint írja, „fő kérdésem az volt, milyen általános következtetést lehetne a sugárzási formulából a sugárzás szerkezetére és általában a fizika elektromágneses

alapjaira nézve levonni.” E töprengés egyelőre nem vezetett eredményre. „Újból és újból kétségbevonam, hogy a helyes törvényeket ismert tényekre támaszkodó konstruktív törekvéssel lehetne fellelni. Mennél tovább és mennél kétségbeesettebben törtem magam, annál erősebbé vált bennem a meggyőződés, hogy csak általános formális elv vezethet bennünket a biztos eredményre” [55]. Einstein tehát már magába gyűjtötte a klasszikus elektrodinamika és optika elméleti és kísérleti eredményeit, megismerkedett a mozgó testekre, valamint a sugárzás jelenségeire való kiterjesztésük nehézségeivel, s e tudásanyagot rendezetlen tömegnek találta, amelyet a részletekből kiindulva (mint Cohn), „konstruktíve” nem sikerült rendeznie. Ismerte a Maxwell—Hertz-elméletet, ismerte Lorentz elektronelméletét a Versuchból, Abraham és Wien cikkeiből, könyveiből, és most elvet keres, amely nem konstruktíve, induktíve, hanem axiomatikusan, deduktíve tenné lehetővé a tények és gondolatok illeszkedését.

Einstein az egyik előbbi idézetben a fizika elektromágneses alapjairól beszélt. Ha ezen az elektromágneses világképet érti, még érthetőbbé válik, miért érezte a mozgó testek elektrodinamikája problémáit az egész fizika problémáinak.

Ez a reménytelen helyzet érlelte meg benne az elhatározást: „A közeljövőben gázok molekuláris erőivel fogok foglalkozni, majd átfogó elektronelméleti tanulmányokba kezdek.” (Bessonak valószínűleg 1903 januárjában írt levelében [56].) Mielőtt e kijelentést méltatnám, melléállítom W. Wien alábbi mondatát, amely Lorentz kontrakciós hipotézisére vonatkozik: „Ezzel meg lehetne magyarázni a Michelson-féle eredményt, ha a molekulamozgástól eltekinthetünk. Mily mértékben helyes ez, azt csak gázelméleti kutatásokkal lehet megmutatni” [57]. Nem ez a gondolat köti-e össze Einstein Bessonak említett két témáját? A kérdést nyitva hagyom, s visszatérek Einstein leveléhez.

A levél valami újat jelent be Einstein kutatásaiban: a végső nekilendülést. Erről életrajzírói nem tesznek említést, talán, mert úgy vélik, a már megvizsgált források is elegendők ahhoz, hogy a speciális elmélet gyökereit megtalálhassák. Éppen ez a levél tanúskodik azonban arról, hogy Einstein szükségét érezte ennek a végső felkészülésnek, tehát fontos szakasza elmélete megszületésének.

Egy elv már kb. 1896-tól magától értetődő lehetett Einsteinnek: az az elv, amelyet általában Mach fogalmazott meg, matematikailag pontosan pedig először Lorentz (a megfelelő állapotok elve), majd ismét általában Poincaré: ez a relativitási elv, amely a tér (helyzet) és az idő (időpont) relativitása. Térjünk ki tehát arra, miképp találkozhatott Einstein ezekkel a gondolatokkal, általában pedig a pozitivistá természetfilozófiával.

Einstein figyelmét Michele Besso hívta föl Mach két könyvére, a Mechanikára és a Hőtanra [58]. Mach Einsteinre három szinten hatott:

1. tudatosította benne fogalmaink történetiségét, az egyén és a társadalom fejlődésétől való függését. Dogmák, a priorinak vélt fogalmak váltak kérdésessé, majd találták meg új helyüket ebben a felfogásban.

2. Mach konkrétan elemezte, hogyan alakul ki bennünk valamely „abszolút” fogalom. A tudományos fogalom (pl. tétel) felismerése, bebizonyítása során, a végeredmény már a bizonyítás kezdetén jelen van, de csak homályosan, ösztönösen. Ez az ösztönös tudás a priorinak tűnik, pedig az egyén és a társadalom felgyűlt tapasztalatainak nem tudatosodott általánosítása. A tudomány fejlődése abból áll, hogy az ösztönös tudást „tudatos” tudássá változtatja. Az ösztönös tudás valaminek a tagadása: azt mondja meg, miképp nem mehet végbe valamely jelenség. Talán Einstein meglátta a párhuzamot az ösztönös tudás és bizonyos fizikai elvek



között: az örökmozgó lehetetlenségének elve (a termodinamika II. főtétele), a transzláció megfigyelhetetlenségének elve (a relativitási elv) — mindketten negatív elvek.

3. Mach megmutatta, hogy „az abszolút térről és az abszolút mozgásról senki sem tud semmit, ezek csupán gondolatképződmények, amelyeket a tapasztalat nem támaszt alá. Mechanikánk alaptételei ... a testek relatív helyzetére és mozgására vonatkozó tapasztalatok” [59]. Ami pedig a fizika mechanikai megalapozását illeti, Mach ennél általánosabb elméletet javasol: olyant, amelyben az általános fenomenologikus törvények a mechanikaiakat speciális esetként tartalmazták, s amely a mechanikát nem is annyira magyarázatra, hanem inkább *mintaként*, útmutatóként használja ilyen általános törvények felkutatására [60]. E felfogásban keressük annak a magyarázatát, miért alkotta meg Einstein a mozgó testek elektrodinamikáját új kinematika felvázolásával.

Pozitivistákkal foglalkozott Einstein 1902 és 1904 között is, az Olympia Akadémiának nevezett baráti körben. Újraolvasta Mach könyvét, a Mechanikát, megismerkedett többek között Pearson, Hume és Poincaré egy-egy munkájával [61]. Kezdjük Poincaré Tudomány és föltevés című könyvével, abban is a relativitási elvre vonatkozó résszel.

Poincaré annak eldöntésére keres kritériumot, milyen a valóság geometriája. Az egyenes tulajdonságait nem tartja célravezetőnek, a távolságéit sem. Talán valamilyen elv megsértése alapján lehetne a kérdést eldönteni? Ez az elv lehetne pl. *a tér relativitásának elve*. Miben áll ez? „Vegyünk fel egy tetszés szerinti anyagi rendszert; tekintsük egyrészt testeinek állapotát (pl. hőmérsékletét, elektromos potenciálját stb.), másrészt a térben elfoglalt helyzetüket; azok között az adatok között, amelyek e helyzetet meghatározzák, különböztessük meg a testek kölcsönös távolságát, amelyek egymáshoz viszonyított helyzetüket meghatározzák, és azokat a feltételeket, amelyek a rendszer abszolút helyzetét és a térben való abszolút orientációját határozzák meg.

Az ezen rendszerben lejátszódó jelenségek törvényei eme testek állapotától és egymástól vett kölcsönös távolságától fognak függni, de a tér relativitása és passzivitása miatt egyáltalán nem fognak függni abszolút orientációjától.

Más szóval a testek állapota és egymástól vett kölcsönös távolsága, valamely időpontban, a testeknek a kezdeti időpontban való állapotától és kölcsönös távolságától függ, de független teljesen a rendszer kezdeti abszolút helyzetétől és kezdeti abszolút orientációjától. Ez az, amit a rövidség kedvéért *a relativitás törvényének* fogok nevezni” [62].

Fontos megfigyelnünk, hogy Poincaré a testek állapothatározói között az elektromos potenciált is megemlítette, tehát nemcsak mechanikai rendszerre gondolt, hanem elektrodinamikaira is. A továbbiakban Poincaré tagadja az abszolút tér és idő létezését, és a név nélkül említett Michelson—Morley-kísérlet eredményét nemcsak másodrendben tartja negatívnak, hanem egzaktul.

Ugyancsak e művében írja Poincaré a következőt: „Nemcsak két időtartam egyenlőségéről nincs közvetlen intuíciónk, hanem két olyan esemény egyidejűségéről sem, amelyek különböző helyen zajlanak le” [63].

Az Olympia Akadémia többi olvasmányai közül most Pearson általuk hosszabban tanulmányozott „The Grammar of Science”-je egyik részletét ragadom ki: „Amikor azt mondjuk — írja Pearson —, hogy négy óra múlt el reggeli óta, ezen azt értjük elsősorban, hogy óránk ... nagy mutatója négyszer járt körbe a számlapon” [64]. Miként mondta ezt Einstein? „Azt gondolhatnánk, hogy az „idő” definíció-



ját illető minden nehézséget kiküszöbölhetnénk, ha az «idő» kifejezés helyére az «óránk kis mutatójának állása» kifejezést tennénk» [65]. Az idő és az egyidejűség definíciója körüli nézetek fontossága nemsokára nyilvánvalóvá válik, de előbb térjünk vissza történetünk fonalához.

Einstein tehát 1896 körül magától értetődőnek tarthatta a relativitási elvet. Az elvnek sem elnevezése, sem tartalma nem az ő találmánya: más kérdés, hogy pontosan és következetesen ő használta először [66]. Bucherer is az elv térhódítását említette, Poincaré pedig a Michelson—Morley-kísérlet negatív eredményét „valamilyen alapvető ösztön szavára” nem tartotta meglepőnek [67]. A probléma gyökere tehát nem a relativitási elvnél volt, hanem ott, miként lehet ezt az elvet összeegyeztetni a fénysebesség állandóságának maxwelli elvével.

A két elvet Einstein többféleképpen próbálta összeegyeztetni, de csak egy próbálkozását említette konkrétan, Shanklandnak. Arról beszélt neki, hogy 1905 előtt már gondolkozott Ritz emissziós elméletén, de elvetette, mivel nem tudott olyan differenciálegyenletet találni, amelynek megoldása a fényforrás sebességétől is függő sebességű fényhullámot adott volna. Az emissziós elmélet olyan fázisviszonyokra vezetett volna, folytatta, hogy a fénysugár „csúszott” volna, sőt, önmagába tolódott volna [68].

Einstein itt hátravetíti az időben Ritz elméletének elnevezését, mivel Ritz csak 1908-ban publikálta ún. ballisztikus elméletét. A fényforrás sebességét hozzáadta a fény terjedési sebességéhez, azaz a fényforráshoz viszonyított sebességet tételezte föl állandónak, s ezzel — lényegében Hertz alapföltevésével — magyarázni próbálta a Michelson—Morley-kísérletet és minden más, mozgó testek optikájára vonatkozó kísérletet. Elvetette az éter létezését, s elméletét részecskeelmülethez hasonlította [69]. Einstein megjegyzéseiből arra következtethetünk, hogy ő viszont hullámelméleti felfogásban próbálkozott ilyen elmélet kidolgozásával.

Próbálkozásai mind zsákutcába futottak. Newton mechanikája még kielégítette a relativitási elvet, Lorentz (1904 előtti) elektronelmélete már nem, pedig a Michelson—Morley-féle kísérlet ezt követelte volna meg [70]. Új elméletet kellene tehát felállítani...

Ekkor Einstein gondolatai hirtelen fordulatot vettek. J. Ehratnak mesélte el, hogy egyszer reggel kipihenten ébredve ült az ágyában, és hirtelen rájött, hogy két esemény, ha egy megfigyelőnek egyidejű, nem biztos, hogy egy másiknak is az [71]. Megértette, hogy a megoldás nyitja az idő fogalmában rejlik [49].

E gondolat megfogalmazása és a cikk befejezése között öt vagy hat hét telt el [72]. Mivel egy Habichtnak 1905. március 6. után írt levelében Einstein arról ír, hogy a cikk fogalmazványa készen áll [73], ez a bizonyos reggel 1905 januárjában vagy februárjában lehetett.

Az idő fogalmának újraértékeléséhez szélesebb alapul az idő pozitívista definíciója szolgált. Hiszen mind a „helyi idő”, mind pedig az „általános idő” óra leolvasásával állapítható meg, tehát nem lehet különbséget tenni köztük. E pozitívista alap közvetett hatását említi Einstein Mach-émlékbeszédében is [74]. Voltak tehát előzmények, mégis sajátjának érezte ezt a gondolatot. Miért?

Mert új volt a környezet, az összefüggés, amelybe e gondolat beleszületett. Az idő új, fényjeles szinkronizálásán alapuló definíciójával „Lorentz elméletének alapegyenletei kielégítik a relativitási elvet, ha a fentebb leírt transzformációkat (ez a Lorentz-transzformációt jelenti, I. J.) más olyan egyenletekkel helyettesítjük, amelyek megfelelnek az idő új fogalmának. Ekkor Lorentz és FitzGerald feltevése az elmélet

szükségszerű következményévé válik” [70]. Az einsteini logika szerint tehát érthetővé válik, miért lehet, sőt kell, a Lorentz-kontrakciót nem-elektromos testekre is kiterjeszteni: kinematikai, valamint mérési oka van ennek a jelenségnek, nem az anyag mibenlétében gyökerezik. Fölöslegessé válik Lorentz nehézkes gondolatmenete, elesik Poincaré azon kifogása, hogy Lorentz ad hoc hipotézisek híve, teljesül Cohn igénye, hogy lehetőleg minél kevesebb hipotézissel érjünk célt, s Abraham és mások gondolja is megoldódik: a síkhullámok minden inerciarendszerben izotrop terjednek stb., stb. Más szóval, a két elv következetes, minden *eddig* (!) filozófiai sallangtól megszabadított egyeztetése új időfogalom révén, varázsütésre rendet teremtett a már rég felgyült jelenségek és elméletek világában. Az előbbi fejezetekben idézett egyenletek, kifejezések sokféle jelölésmódja is azt akarta érzékeltetni, hogy bizonyos alapvető irányok mellett mekkora változatossága létezett nemcsak a fizikai gondolatoknak, hanem a matematikai apparátusnak is. A kutatók sok hipotézissel dolgoznak az anyag felépítéséről, a részecskék közötti erőről, a részecskék alakjáról, így a megfontolások elszakíthatatlanok az elektromágnességtől. Lorentz, Abraham, Föppl stb. elméleti konstrukciói után Einstein gondolatai valószínűtlenül vértelenek, hús nélküli csontváz benyomását keltik, és hihetetlennek, sőt gyanúsak tűnik, miként lehet meglenni az anyagra vonatkozó feltevések nélkül. Ráadásul az éterhez képest nyugvó vonatkoztatási rendszer is kiesett a fegyvertárból.

Fel kell ezek után tennünk a paradox kérdést: vajon elmélet Einstein elmélete?

Ehrenfest így nevezte Einstein gondolatait: „Lorentz relativisztikus elektrodinamikája Einstein megfogalmazásában”, s zárt rendszernek tartotta őket. Einstein hevesen tiltakozott: „A relativitási elv — vagy pontosabban a relativitási elv és a fénysebesség állandóságának elve együtt, nem fogható föl „zárt rendszernek”, sőt, semmiféle rendszernek sem, hanem csupán heurisztikus elvnek, amely önmagában tekintve szilárd testekre, órákra és fényjelekre vonatkozó kijelentéseket tartalmaz. A továbbiakat a relativitáselmélet csak annak révén nyújtja, hogy összefüggést követel egykor egymástól függetlennek tűnő törvényszerűségek között ... Itt tehát semmiképp sincs szó olyan „rendszerrel”, amelyben az egyes törvények impliciten benne rejlenének, s belőle dedukcióval kellene feltárni őket, hanem csupán elvről, amely lehetővé teszi, hogy (mint a hőelmélet második főtétele) bizonyos törvényeket másokra visszavezethessünk” [75].

De erről beszél magában az 1905-ös cikkben is: „Az itt használt *módszerrel* (kiemelés tőlem, I. J.) a mozgó testek optikájának minden problémája megoldható” [3]. Ha tehát a kérdést, elmélet-e Einstein elmélete, ezek után így fogalmazom át: *elméletnek tartotta-e Einstein 1905-ben a speciális relativitáselméletet*, a válasz világos: *nem, nem tartotta annak, hanem módszernek tartotta a mozgó testek elektrodinamikája tökéletesebb leírására, megalapozására.*

E megállapításnak több következménye van.

Először is érthetővé válik a cikk címe. Így lehetne ugyanis kiegészíteni: „Módszer a mozgó testek elektrodinamikájához”, s így valóban kifejezi a tartalmát.

Másodszor e módszertani beállítottsággal és céllal magyarázható, miért nem tartotta Einstein fontosnak, hogy akár elméleti, akár kísérleti forrásait idézze, megnevezze. Ami ugyanis cikkében ismert tény vagy megállapítás, nem tartozik lényegéhez, csak rendezendő halmazt jelent, amelyen a módszer erejét ki lehet próbálni. Ami pedig a cikkben új volt, a két elv egybehangolása új idődefinícióval, annak egyértelmű forrásait talán nem is tudta volna megnevezni, hacsak nem filozófia-



történeti munkát ír. Az is érthető ezek után, miért éppen Bessot említi egyedül: ő segítette ebben az újbán, ő vezette Machhoz.

Az idézetek és a kísérletezők nevének hiányát többen kommentálták már úgy, hogy Einstein nem is tudott elődei eredményeiről vagy ha tudott, lebecsülte, másodrangúnak minősítette őket. Konkréten a Michelson—Morley-féle kísérlet jelentőségét szeretik ilyen alapon csökkenteni, s azzal érvelnek, hogy ez, és általában az experimentum crucisok, nem játszanak olyan nagy szerepet egy elmélet megteremtésében vagy igazolásában, mint a közvélemény tartja. A kutató intuícióját, egyéni képességeit állítják így szembe a társadalmi feltételekkel, s Einsteint, épp e cikke és a Michelson—Morley-féle kísérlethez való viszonya révén, azon irányzat cégerének használgják, hogy a társadalmi körülményeknek nincs akkora jelentősége, mint az egyénnek [76]. Holton majdnem kétségbe vonja, hogy Einstein tudott e kísérletről, s bármennyire igaz, hogy az idős Einstein ingadozott a kísérlet jelentőségének megítélésében, az általa tanulmányozott Versuch egész fejezetet szentel a kísérletnek, és felsorolja az addig elvégzett összes lényeges, hasonló célú kísérletet is. De említi Michelson és Morley eredményét Abraham, Lorentz és Cohn is. A fiatal Einstein nem becslte le a kísérletet: az 1897/98-as tanévben még berendezést is akart építeni, hogy megmérje a Föld abszolút mozgási sebességét [77]. Különben is egy Mach-követő nem nézheti le a kísérleteket. Nem von le a Michelson—Morley-kísérlet jelentőségéből semmit, hogy Einstein a speciális relativitáselmélet kialakulása szempontjából még fontosabbnak tartotta Fizeau áramló vízben végzett fénysebességmérését és az aberrációt. Nem alakulhatott volna ki benne szilárd, szinte a priori meggyőződés az elektrodinamika és a mechanika teljes relativitásáról, ha egyetlen kísérlet is ellene szólt volna.

Végül, harmadik következményként, tudománytörténeti megállapítást kell korrigálnom. Miután Holton Einstein cikkének sajátos felépítését mások (Helmholtz, Hertz, Lorentz, Poincaré stb.) cikkeiben, írásaiban kereste, megállapítja, hogy a cikket nem lehet sem a Lorentz—Poincaré-féle, sem a Maxwell—Helmholtz—Boltzmann-féle, sem pedig a Kirchhoff—Mach—Hertz-féle fejlődési lánchoz kapcsolni [2]. Milyen alapon is kapcsolhatta össze Holton ezeket a neveket? Helmholtz és Boltzmann a Maxwell-elmélet terjesztői voltak Németországban; Kirchhoff, Mach és Hertz a klasszikus mechanika bírálatát végezték el; Lorentz és Poincaré az elektronelmélet kidolgozásában és továbbfejlesztésében működött együtt egymással, és jutott hajszálra arra az eredményre, mint Einstein. Holtonnak igaza van: Einstein cikke nem kapcsolható egyik lánchoz sem, de abban már téved, hogy mivel Föppl könyve hasonlít legjobban a cikke, Föppl Einstein fő tanítója és inspirátora.

Véleményem szerint Einstein Helmholtztól és Hertzről tanulta a maxwelli elektrodinamikát, Boltzmann, Föppl, Lorentz, Poincaré olvasása pedig növelte ezt az alaptökvét. Ennek alapján Einsteint a Maxwell—Helmholtz—Hertz-féle lánchoz kapcsolom, amelyre az jellemző, hogy Maxwell elméletének logikai következetlenségeit küszöbölte ki. E csoport munkái szorosan kapcsolódnak Weber professzornak a Politechnikumon tartott előadásaihoz is, és szerves folytatását képezik Einstein tanulmányainak.

Ezzel azonban nem azt akarom mondani, hogy Einstein cikkének sajátos felépítése is e csoport gondolataiban vagy éppen valamelyik munkájában gyökerezne. A II. táblázatból látható, hogy Einstein cikke néhány fejezete és gondolata, ugyanolyan sorrendben, mások cikkeiben, írásaiban is megtalálható; különösen Bucherer,



## II. TÁBLÁZAT

Einstein 1905-ös cikkének [1] témái (II. rész) elődei és kortársai írásaiban

	Hertz 1890 [19]	Föppl 1894 [9]	Cohn 1900 [47]	Lorentz 1895 [28]	Lorentz 1903 [48]	Bucherer 1904 [41]	Abraham* 1905
Az alapegyenletek							
mozgó rendszerben	+		+	+	+	+	+
Indukció	+	+	+	+			
Dopp'er-effektus				+	+	+	
Aberráció					+	+	+
A fénysugár energiájának transzformálása					+	+	+
Ideális tükörre gyakorolt sugárnyomás			+		+		+
Alapegyenletek mozgó rendszerben árammal							
Az elektron dinamikája					+	+	
(Michelson—Morley- kísérlet)				+	+	+	+
(Fényjeles szinkronizálás)							+

\*M. Abraham: Elektromagnetische Theorie der Strahlung, 1905, Teubner, Leipzig, II. Abschnitt, 2. Kapitel.

Lorentz és Abraham egy-egy írása áll Einsteinéhez közel, mégsem mondhatjuk, hogy egyedül tőlük szerezte volna elektrodinamikai vagy elektronelméleti tudását.

Éppen azt kifogásolom, hogy a tudománytörténészek szerint Einstein elméletet alkotott, tehát elméletet is kell keresnünk, ha előzményeit kutatjuk. Einstein cikke azonban nem elmélet akart lenni, hanem módszer, s így nem csodálatos, hogy nem találhattak eddig egyértelmű elődeire.

## IRODALOM

1. A. Phys. 17, 891, 1905; idézetek a magyar fordítás alapján, M. Fiz. F. 3, 441, 1955.
2. G. Holton: The Metaphor of Space-Time Events in Physics, Eranos-Jahrbuch, 24, 41, 1965.
3. [1] 461.
4. H. A. Lorentz: Electromagnetic Phenomena in a System Moving with Any Velocity Smaller Than That of Light, Proc. Acad. Sci. Amsterdam, 6, 809, 1904; magyarul M. Fiz. F. 3, 191, 1955.
5. [1] 456.
6. [1] 464.
7. C. Seelig: Albert Einstein und die Schweiz, 1952, Europa, Zürich — Stuttgart — Wien, 34.
8. A. Einstein: Autobiographisches, ed. A. Schilpp: Albert Einstein Philosopher-Scientist, 1949, Tudor, New York, 14.
9. A. Föppl: Einführung in die Maxwellsche Theorie der Elektrizität, 1894, Teubner, Leipzig.
10. M. Abraham, A. Föppl: Theorie der Elektrizität, Band I—II, 1904—1905, Teubner, Leipzig.
11. A. Reiser: Albert Einstein, A Biographical Portrait, 1930, Boni, New York, 49.
12. Idézi Holton, [2] 42.
13. Ph. Frank: Einstein, His Life and Times, 1949 Cape, London, 31.
14. H. A. Lorentz: Maxwells elektromagnetische Theorie, Weiterbildung der Maxwellschen Theorie, és Elektronentheorie, később az Encyclopädie V/2 kötetében, 1922-ben kiadva, Teubner, Leipzig.

15. Recueil de travaux offerts par les auteurs à H. A. Lorentz à l'occasion du 25<sup>me</sup> anniversaire de son doctorat, 1900, Nijhoff, Le Haye.
16. *G. Kirchhoff*: Vorlesungen über mathematische Physik, Band I—IV., I. Aufl., 1876. Teubner, Leipzig.
17. Über die Bewegungsgleichungen der Elektrizität für ruhende leitende Körper, 1870; Wissenschaftliche Abhandlungen, 1895, Barth, Leipzig, Band I., 545; Über die Fortpflanzungsgeschwindigkeit der elektromagnetischen Wirkungen, 1871, W. A. 292; Über die Theorie der Elektrodynamik, 1872, W. A. 636; Die elektrodynamischen Kräfte in bewegten Leitern, 1874, W. A. 702; Kritisches zur Elektrodynamik, 1874, W. A. 763; Versuche über die ungeschlossenen Kreise durch Bewegung inducirten elektromotorischen Kräfte, 1875, W. A. 774.
18. *A. Einstein*: Lorentz als Schöpfer und als Persönlichkeit, Mein Weltbild, 1953, Zürich, 35.
19. *H. Hertz*: Über die Grundgleichungen der Elektrodynamik für bewegte Körper, 1890, Gesammelte Werke, 2. Aufl. Band 2., 1894, Barth, Leipzig, 256.
20. [19] 263.
21. *H. Hertz*: Über die Grundgleichungen der Elektrodynamik für ruhende Körper, 1890, G. W. Band 2., 209.
22. *G. W.* Band 2, 22—23.
23. *L. Boltzmann*: Vorlesungen über Maxwells Theorie der Elektrizität und des Lichtes, Band I—II, 1891, 1893, Barth, Leipzig.
24. [9] 309.
25. [9] 324.
26. [19] 272.
27. *C. Seelig*: Albert Einstein. Leben und Werk eines Genies unserer Zeit, 1960, Europa, Zürich — Stuttgart — Wien, 116.
28. *H. A. Lorentz*: Versuch einer Theorie der electrischen und optischen Erscheinungen in bewegten Körpern, 1895, Brill, Leiden.
29. *H. A. Lorentz*: La théorie électrodynamique du Maxwell et son application aux corps mouvants, 1892, Brill, Leiden. Born cikke: Physics and Relativity, Jubilee of Relativity Theory, Helv. Phys. Acta Suppl. IV, 1956, 248.
30. [28] 123—124.
31. [28] 50.
32. [28] 85.
33. [28] 4.
34. *H. A. Lorentz*: Über die scheinbare Masse der Ionen, Phys. Z. 2, 78, 1901.
35. *W. Kaufmann*: Die elektromagnetische Masse des Elektrons, Phys. Z. 4, 54, 1903.
36. *M. Abraham*: Prinzipien der Dynamik des Elektrons, Phys. Z. 4, 57, 1903.
37. *S. Goldberg*: The Abraham Theory of the Electron; The Symbiosis of Experiment and Theory, Arch. Hist. Exact Sci. 7, 23, 1970.
38. [10] Band I., 435.
39. [10] Band II., 369—372. A kötet előszavának dátuma 1905 március.
40. *H. Poincaré*: La théorie de Lorentz et le principe de la réaction, [15] 272.
41. *A. H. Bucherer*: Mathematische Einführung in die Elektronentheorie, 1904, Teubner, Leipzig.
42. *A. Einstein*: Über eine Methode zur Bestimmung des Verhältnisses der transversalen und longitudinalen Masse des Elektrons, A. Phys. 21, 586, 1906.
43. *W. Wien*: Über die Möglichkeit einer elektromagnetischen Begründung der Mechanik, [15] 96; A. Phys. 5, 501, 1901.
44. *E. Cohn*: Über die Gleichungen der Elektrodynamik für bewegte Körper, [15] 516.
45. *E. Cohn*: Über die Gleichungen des elektromagnetischen Feldes für bewegte Körper, A. Phys. 7, 29, 1902.
46. [45] 30, 55.
47. *E. Cohn*: Das elektromagnetische Feld, 1900, Teubner, Leipzig.
48. *H. A. Lorentz*: Encycl. Mathem. Wiss, V/2, 276 ([14]).
49. *A. H. Bucherer*: Über den Einfluss der Erdbewegung auf die Intensität des Lichtes, A. Phys. 11, 283, 1903.
50. [41] 132—133.
51. [8] 52.
52. *R. S. Shankland*: Conversations with Albert Einstein, Amer. J. Phys. 31, 48, 1963.
53. *J. C. Maxwell*: Ether, Encyclopaedia Britannica, 1877 és 1879 közzét; The Scientific Papers, 1961, Dover, New York, 765.
54. *R. S. Shankland*: Michelson—Morley Experiment, Amer. J. Phys. 32, 16, 1964.

55. [8] 46, 50—52.
56. *A. Einstein, M. Besso: Correspondance* 1903—1955, ed. P. Speziali, 1972, Hermann, Paris, 4.
57. [43] 505.
58. [56] 151, 153.
59. *E. Mach: Die Mechanik in ihrer Entwicklung historisch—kritisch dargestellt*, 1883, Brockhaus, Leipzig, 213.
60. *E. Mach: Prinzipien der Wärmelehre historisch—kritisch entwickelt*, 1896, Barth, Leipzig, 356.
61. *C. Pearson: The Grammar of Science*, 1892, idézet az 1937-es kiadás szerint, Dent, London;  
*D. Hume: A Treatise on Human Nature*, 1928, Dent, London — Toronto; *H. A. Poincaré: La science et l'hypothèse*, 1902, Flammarion, Paris.
62. I. m. 82—83.
63. Uo. 111.
64. I. m. 159.
65. [1] 442.
66. *H. A. Lorentz* a [4]-hez 1912-ben írt megjegyzésében.
67. *Science et l'hypothèse*, 286—287.
68. [52] 49.
69. *W. Ritz: Recherches critiques sur l'électrodynamique générale*, *A. Chim. Phys.* 13, 145, 1908;  
*Recherches critiques sur les théories électrodynamiques de Cl. Maxwell et H. A. Lorentz*, *Arch. sci. phys. nat.* 26, 209, 1908.
70. *A. Einstein: Über das Relativitätsprinzip und die aus demselben gezogenen Folgerungen*, *Jahrb. Radioakt. Elektronik*, 4, 413, 1907.
71. [27] 118.
72. [7] 71—72.
73. [7] 77.
74. *A. Einstein: Ernst Mach*, *Phys. Z.* 17, 101, 1916.
75. *A. Einstein: Bemerkungen zu der Notiz von Hrn. Paul Ehrenfest: „Die Translation deformierbarer Elektronen und der Flächensatz“*, *A. Phys.* 23, 206, 1907.
76. *G. Holton: Einstein and the „Crucial Experiment“*, *Amer. J. Phys.* 37, 969, 1969; *H. Gutting: Einstein's Discovery of Special Relativity*, *Philos. Sci.* 39, 51, 1972; *I. Lakatos: The Role of Crucial Experiments in Science*, *Stud. Hist. Philos. Sci.* 4, 309, 1974; *P. L. Quinn: Some Epistemic Implications of „Crucial Experiments“*, *Stud. Hist. Philos. Sci.* 5, 59, 1974; lásd ezen kívül *E. G. Zahar: Why Did Einstein's Programme Supersede Lorentz's?* (*Brit. J. Philos. Sci.* 24, 95, 223, 1973) cikkéről a *Brit. J. Philos. Sci.* 1974/1. számában folytatott vitát.
77. [11] 66.



MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA

# KÖNYVISMERTETÉS

H. Walter (szerk.): *Laser Spectroscopy of Atoms and Molecules*  
Topics in Applied Physics. Springer Verlag, 1976.

A jól ismert sorozatnak ezen újabb kötete hasonlóan a sorozat előbbi kötetéhez kiűnik a publikáció gyorsaságával. Ennek következtében az összefoglaló cikkek valóban az éppen aktuális helyzete tükrözik az adott témakörben.

A kötet hat referáló cikket tartalmaz. K. Shimoda, a kvantumelektronika nemzetközileg ismert tekintélye, a lasereknek a kettős rezonancia spektroszkópiában való alkalmazását foglalja össze cikkében. A laserek lehetővé tették a klasszikus Brossel, Kastler és Bitter- féle optikai és rádiófrekvenciás kettős rezonancia módszer általánosítását. Így lehetővé vált az optikai-optikai; az optikai-infravörös; infravörös-infravörös kettős rezonanciás spektroszkópiai vizsgálatok végzése is. Természetesen az a tény, hogy a molekulákkal két koherens sugárzás hat egyidejűleg kölcsön, további érdekes jelenségekhez vezet (lyuk „égetése” a Doppler-sebesség eloszlásba), mi az inkohérens sugárzást használó hajdani optikai-rádiófrekvenciás kettős rezonancia vizsgálatokban nem lépett fel. A szerző cikkében a kettős rezonancia módszer rövid, világos elméleti megfogalmazását adja, majd a molekulákkal kapcsolatos kísérleti eredményeket ismerteti.

Evenson és Petersen cikke a lasereknek egyik leginkább fundamentális fontosságú alkalmazásáról, a fény sebességének méréséről és a laser hossz és frekvencia standard megalkotásáról ad rendkívül jól érthető, világos képet. Jól látható, hogy a laserek klasszikus sugárzása hogyan teszi lehetővé a mikrohullámok tartományában megszokott módszerek alkalmazását, a frekvenciának direkt, számlálásos mérését egészen a közeli infravörös tartományig terjedőleg. Ezen tartományban azonban a hullámhossz is nagy pontossággal mérhető az optikában jól ismert interferometrikus módszerekkel. A stabilan, klasszikusan sugárzó laser sugárzása hullámhosszának és frekvenciájának egyidejű nagy pontosságú mérése lehetővé tette a fény terjedési sebességének igen nagy pontosságú meghatározását, valamint a hosszúság és a frekvencia új, a régieknél lényegesen pontosabb standardjának megalkotását.

Az infravörös tartományban ma már rendelkezünk hangolható, kis sáv szélességű laserekkel, melyekre a spektroszkópiai vizsgálatoknál szükség van. Mindez ma még nemigen mondható el a látható tartományra, bár a hangolható kis sáv szélességű festék laserek fejlesztése nagy ütemben folyik. Éppen ezért az infravörös tartományban már viszonylag sok spektroszkópiai vizsgálatot végeztek laserekkel. Ezeket a vizsgálatokat referálja Hinkley, Nill és Blum, jó áttekintést adva az infravörös tartományban rendelkezésünkre álló hangolható laserekről és azok tulajdonságairól, a detektálás módjairól és az elvégzett vizsgálatokról.

A Raman effektus igen gyenge effektus. Ezért a legnagyobb probléma a megfelelő intenzitású gerjesztő fény biztosítása. A laserek megalkotása és megfelelő nagyintenzitású, rövid hullámhosszú laser kidolgozása (argon ion) nagyon megjavította a Raman spektroszkópiás vizsgálatok lehetőségét. Mindezek ellenére a megfelelő gerjesztési geometria a Raman spektrometriás vizsgálatok egyik centrális problémája. Cherlow és Porto cikkeiben hosszasan foglalkoznak a szórt fény begyűjtésének módszereivel és ismertetik a legújabb mérési eredményeket.

A laser a legkiválóbb fényforrás optikai pumpálás céljára. Sajnos, a látható tartományban még nem rendelkezünk megbízhatóan hangolható kis sáv szélességű laserrel. Ez még inkább igaz volt abban az időben, amikor Decomps Dumont és Ducloy ezen típusú vizsgálataikat végezték. Ezért a pumpált gáz megegyezett azzal a gázzal, amelyet a laserben mint aktív anyagot használtak, ami az ő esetükben neon volt. Összefoglaló cikkükben ezen vizsgálataik eredményeit ismertetik főként, valamint a jelenségek egységes elméleti leírását adják.

H. Walter cikkében igen széles jelenségkörrel próbál összefoglaló képet adni, mégpedig az atomok és molekulák laseres spektroszkópiájáról, beleértve a nemlineáris spektroszkópiát, és ezen belül a telítési spektroszkópia igen változatos jelenségkörét is. Hozzá kell ehhez még azt is tenni, hogy a referált terület igen dinamikus fejlődik, ami a megértést sokszor nagyon megnehezíti. A referált cikkek mennyisége impozáns és a legfrissebb publikációkat is tartalmazza, bár néhány kissé régebbi, de fontos eredményeket tartalmazó publikáció, hiányzik az ismertetésből. Mindenestre lényeges, hogy ezen összefoglaló cikk az első, mely célul tűzte ki sokszor nagyon távolinak tűnő, de egyébként elvileg összetartozó munkák egységes ismertetését (például a többfotonos ionizáció és a telítési spektroszkópiai vizsgálatok).

Bakos József

Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1976. január 23. — Terjedelem: 8,7 (A/5) ív  
76-409 — Szegedi Nyomda — F. v. Dobó József ig.



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK  
**KÖZLEMÉNYEI**

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.

Ára: 10.—Ft  
Előfizetés kötetenként 48,—Ft

INDEX: 26491
--------------

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Perjés Zoltán</i> : Stacionárius gravitációs terek tulajdonságai .....	173
<i>Illy József</i> : Einstein és a mozgó testek elektrodinamikája .....	249

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>H. Walter</i> : Laser Spectroscopy of Atoms and Molecules ( <i>Bakos József</i> ) .....	271
--	-----

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

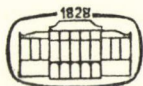
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXIV. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1976



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről levalaszta, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztési levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését, a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# REVERZIÓS ÉS ÚJRA NEMESÉDÉSI FOLYAMATOK VIZSGÁLATA Al-Zn-Mg ÖTVÖZETBEN

GROMA GÉZA—KOVÁCSNÉ CSETÉNYI ERZSÉBET\*

Fémipari Kutató Intézet, Budapest

A reverziót és az újranemesedési folyamatot vizsgáltuk ellenállásméréssel Al-3,3 s% Zn-2,4 s% Mg technikai tisztaságú ötvözetben. Megállapítottuk, hogy szobahőmérsékleti öregítés után a zónák oldódási hőmérséklete 150 °C. Efölött a hőmérséklet felett a szobahőmérsékleten keletkezett zónák 10–30 sec alatt feloldódnak és mérhető mennyiségű kiválás csak hosszabb hőntartás után mutatható ki. Ez azt jelenti, hogy az Al-3,3 s% Zn-2,4 s% Mg ötvözetben adott körülmények között teljes reverzió következik be. A reverzió folyamatának nagy sebességéből és az újraöregedés kinetikájából arra következtettünk, hogy az edzőkor keletkezett vakanciáknak lényeges szerepe van.

## Bevezetés

A nemesíthető Al-Zn-Mg ötvözetek mint szerkezeti anyagok nagy gyakorlati jelentőséggel rendelkeznek. Ezt főként hegeszthetőségüknek köszönhetik.

A szerkezeti anyagok céljára használt Al-Zn-Mg ötvözetek az olvadáspont és kb. 400 °C között szilárd oldatot képeznek. Ez alatt a hőmérséklet alatt az ötvözők oldhatósága erősen csökken a hőmérséklettel. Amennyiben egy ilyen ötvözetet az oldhatósági határnál magasabb hőmérsékletre hirtelen lehűtünk, az ötvözők diszperz részecskék formájában kiválnak. Ez okozza a nemesedést.

A kiválási termékek alacsonyabb hőmérsékleteken először általában nem a stabil  $Zn_2Mg$  összetételű  $\eta$  fázis részecskéi. Szobahőmérséklet közelében pl. kinetikai okokból homogén nukleációval az alumínium mátrixszal koherens, 10–100 Å méretű ZnMg atomcsoportok, ún. Guinier—Preston zónák képződnek. A zónák a környezetükben kialakuló mechanikai feszültségtér és a bennük uralkodó eltérő elektronszerkezet következtében jelentősen megváltoztatják az alumínium mátrix tulajdonságait.

A hőmérséklet növelésével a GP zónák stabilitása egyre csökken, míg egy kritikus hőmérséklet felett teljesen megszűnik, a zónák felbomlanak. Ez a hőmérséklet az összetételtől függően kb. 100–150 °C közé esik.

100 °C közelében a GP zónákkal párhuzamosan egy nagyobb nukleációs gáttal rendelkező, de stabilabb átmeneti fázis, az  $\eta'$  fázis is ki tud alakulni. Ez már csak részben koherens és szerkezete közel áll a stabil  $\eta$  szerkezetéhez, mely utóbbi gyakorlatilag számottevő valószínűséggel csak 200 °C környezetében képződik.

A felhasználás céljától függ, hogy a szerkezeti anyagokban milyen fázisállapotot hoznak létre.

A hegesztés mindig egy rövid hőimpulzust jelent, amely a varrattól mért távolságtól függ és a kiválási szerkezetben lényeges változásokat idézhet elő. A varrat kö-

\* Érkezett 1975. júl. 11.



zelében pl. mindig van egy tartomány, ahol a hőlökés szilárd oldatot eredményez, amely azután szobahőmérsékleten képes újraneemesedni. Ezért vizsgáltuk a nemese-  
dési termékek — többek között a GP zónák — feloldódását, valamint az újrane-  
mesedést. Ebben a dolgozatban a GP zónák reverziójával és az ötvözet újraneemesedé-  
sével foglalkozunk.

### Előzmények

A reverzió jelenségét *Gayler* Al-Cu ötvözetek vizsgálata során fedezte fel 1922-ben [1]. Azt tapasztalta, hogy a GP zónákkal nemesített ötvözeteket hirtelen felmelegítve a keménység lecsökken. A jelenségeket *Gerold* a GP zónák feloldódásával magyarázta [2]. A GP zónák, mivel nem egyensúlyi fázist képviselnek, koegzisztálhatnak más átmeneti vagy stabil fázisokkal, illetve átalakulhatnak azokba. Ez az oka, hogy a reverzió általában nem állítja vissza a tökéletes szilárd oldatot. Ha a felbomlás hőmérséklete és a GP zónák képződésének felső hőmérséklet határa egybeesik, a zónák nem tudnak átalakulni más, stabilabb fázisokba. Ebben az esetben valódi reverzióról beszélünk.

A reverziós jelenségeket Al-Zn-Mg ötvözeteken először *Polmear* tanulmányozta széles összetételi határok között [4]. Ő a GP zónák kritikus hőmérsékletét a GP zónák, illetve az  $\eta'$  fázis által okozott keményedés inkubációs idejéhez tartozó C-görbék metszéspontjából határozta meg. Így *Polmear* kritikus hőmérséklete annak a hőmérsékletnek felel meg, amelynél a zónák és az  $\eta'$  fázis azonos valószínűséggel keletkezik.

*Polmear* eredményeit *Suzuki* és *munkatársai* vizsgálták felül és a hasonló összetételű ötvözetekben kb. 30–35 °C-kal alacsonyabb kritikus hőmérsékletet kaptak [5]. *Suzukiék* különböző hőmérsékleteken mérték az ellenállás változását az edzést követő öregítés folyamán. Így ők a GP zónák képződésének felső határát határozták meg.

Az irodalomban — különböző módszereket felhasználva — számos vizsgálat foglalkozik a kritikus hőmérséklet meghatározásával, általában azonban mindegyik csak egy-egy összetételt vizsgál [6–10]. Mi itt nem ismertetjük ezeket a módszereket, csak azt említjük meg, hogy a kapott reverziós hőmérséklet értékek általában közelebb vannak *Polmear*, mint *Suzuki* és *munkatársai* eredményeihez.

Az a tény, hogy a különböző szerzők által meghatározott kritikus hőmérséklet-értékek jelentős eltérést mutatnak, feltehetően az ötvözetek más-más szennyezés-tartalmával függ össze. *Thackery* és *Thomas* pl. kimutatta, hogy az alumínium két legfontosabb szennyezője, a vas és a szilícium Al-Zn-Mg ötvözetekben lényegesen növeli a GP zónák oldódási hőmérsékletét [11].

A GP zónák oldódási hőmérséklete ( $T_{GP}$ ) környezetében uralkodó viszonyokra *Lorimer* és *Nicholson* adott modellt [6]. A modell az alábbi három esetet különbözteti meg:

1. Az edzett és közvetlenül azután a  $T_{GP}$  fölött öregített mintákban az  $\eta'$  kiválások inhomogén módon nukleálódnak.
2. Az edzett és  $T_{GP}$  alatt öregített ötvözetben az öregedés GP zónák képződésével kezdődik. Azok a zónák, amelyek egy kritikus méretet elérnek, átalakulnak  $\eta'$ -vé.
3. A  $T_{GP}$  alatt előregélt, majd fölötté öregített ötvözetekben a kis zónák feloldódnak, a nagyok azonban túlélnek a hőmérsékletnövekedést és közvet-



lenül  $\eta'$ -vé alakulnak, anélkül, hogy közben áthaladnánk a szilárd oldat állapotán. Ez azt jelenti, hogy az ilyen ötvözetekben nincs valódi reverzió és  $T_{GP}$  a zónák képződésének felső határát reprezentálja.

Asano és Hirano [7] kalorimetrikus eredményei ellentmondanak Lorimer és Nicholson fenti modelljének, amely elektronmikroszkópos vizsgálatokon alapult. Asano és Hirano arra a következtetésre jutottak, hogy a GP zónák nem lehetnek  $\eta'$  magjai, mivel koegzisztálni tudnak, sőt, túl is élhetik az  $\eta'$  részecskéket.

Lorimer és Nicholson  $T_{GP}$ -t úgy definiálta, mint a precipitátumok homogén nukleációjának felső határát (termodinamikai modell). Pashley és munkatársai [12] Al-Mg-Si ötvözeteken végzett vizsgálataik alapján egy kinetikus megfogalmazást adtak:  $T_{GP}$  az a maximális hőmérséklet, amelyen homogén nukleáció még létrejöhet akkor, ha nincsenek többlet-vakanciák. A többlet-vakanciák megnövelhetik a homogén nukleáció felső határát.

Ez a modell meg tudta magyarázni a kritikus hőmérséklet függését a többlet-vakanciák koncentrációjától (tehát az edzési hőmérséklettől és sebességtől) Al-Mg-Si ötvözetben. Asano és munkatársai azonban Al-Zn-Mg ötvözeteknél nem észlelték  $T_{GP}$ -nek az edzési sebességtől való függését.

Ugyanakkor Kawano és munkatársai [9] különböző  $T_{GP}$ -t kaptak, ha közvetlenül az öregítési hőmérsékletre edzettek vagy előbb szobahőmérsékleten végezték az edzést, majd azonnal (20 másodpercen belül) felmelegítették a mintákat az öregítés hőmérsékletére. Ez utóbbi megállapítás, valamint az ilyen ötvözetben sok esetben megfigyelt edzési sebesség érzékenység [8, 13–15] nemcsak a többlet-vakanciáknak lehet a következménye, hanem az edzés és az újbóli felfűtés közben keletkező kiválásoknak is.

Különböző Al-ötvözeteken több vizsgálat van, amely a zónákhoz kötött vakanciáknak a reverzió és az újránemesedés kinetikájára gyakorolt hatását mutatja [16, 17]. A reverzió nagy sebességét Federighi és Thomas a zónákból felszabadult vakanciák szerepével magyarázta [18]. Az ilyen vakanciák létezésének közvetlen bizonyítékát Horiuchi adta meg, amikor Al-Zn ötvözetben megfigyelte a reverzió folyamán a diszlokáció-hurkok növekedését [19]. A reverzió során a vakanciák felszabadulása, majd a különböző nyelőkön az eltűnése eredményezi az újránemesedés sebességének csökkenését az edzett minták nemesedésekor észlelt sebességhez képest [16].

Al-Zn-Mg ötvözeteken eddig ilyen vizsgálatokról nincs tudomásunk.

### Kísérleti rész

A méréseket technikai tisztaságú Al-Zn-Mg ötvözetben végeztük, amelynek összetétele az alábbi volt: 3,3 s % Zn, 2,4 s % Mg, 0,20 s % Mn, 0,10 s % Ti, 0,32 s % Fe, 0,24 s % Si. Öntés után a tuskókat melegen 6 mm vastagra hengereltük.

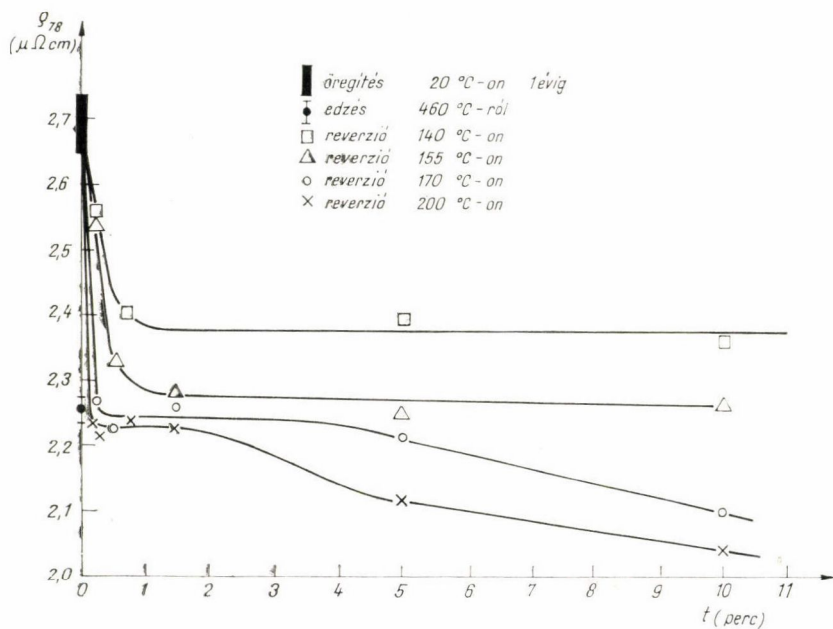
Az ellenállásméréseket potenciometrikus módszerrel  $6 \times 6 \text{ mm}^2$  keresztmetszetű minták 30 mm hosszú szakaszán végeztük. A mérés érzékenysége  $2 \cdot 10^{-8} \text{ V/mm}$  volt.

A reverziós folyamatok vizsgálatához a lemezeken  $470^\circ\text{C}$ -on 1 óráig oldó hőkezelést hajtottunk végre, vízben edzettük, majd egy évig szobahőmérsékleten öregítettük őket. Ezután a minták sófürdőben  $140\text{--}200^\circ\text{C}$  között 10 másodperctől 1 óráig tartó hűlökést kaptak. A fürdő hőmérsékletének stabilitása  $\pm 0,5^\circ\text{C}$  volt,

amelyet Ni-CrNi termoelemmel ellenőriztünk és regisztráltunk. Az így hőkezelt minták ellenállását az edzés után közvetlenül (két percen belül), majd a szobahőmérsékleten történt öregítés során 30—90 napig mértük. A méréseket 78 K-on, cseppfolyós nitrogénben végeztük.

### Eredmények

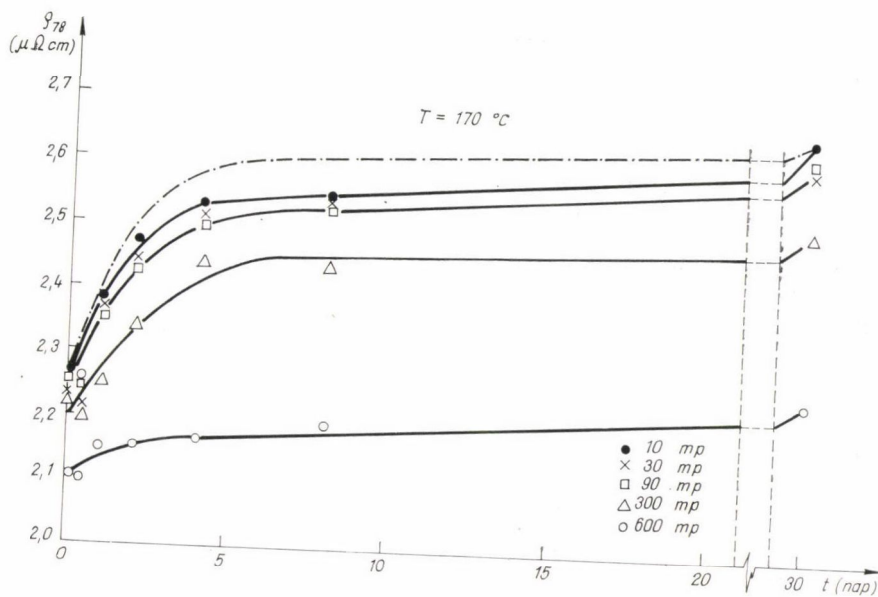
A revertáló hőkezelést 140, 155, 170 és 220 °C-on végeztük. Az 1. ábrán láthatók az ellenállásértékek, amelyeket közvetlenül a különböző időtartamú hűlések után mértünk. Az ábra a mintáknak a hűlés előtti ellenállását, valamint a szilárd oldatnak megfelelő értéket is mutatja. Látható, hogy 155 °C-on és efölött végzett hőkezelés hatására az ellenállás már egy rövid hűlés alatt is leesik a szilárd



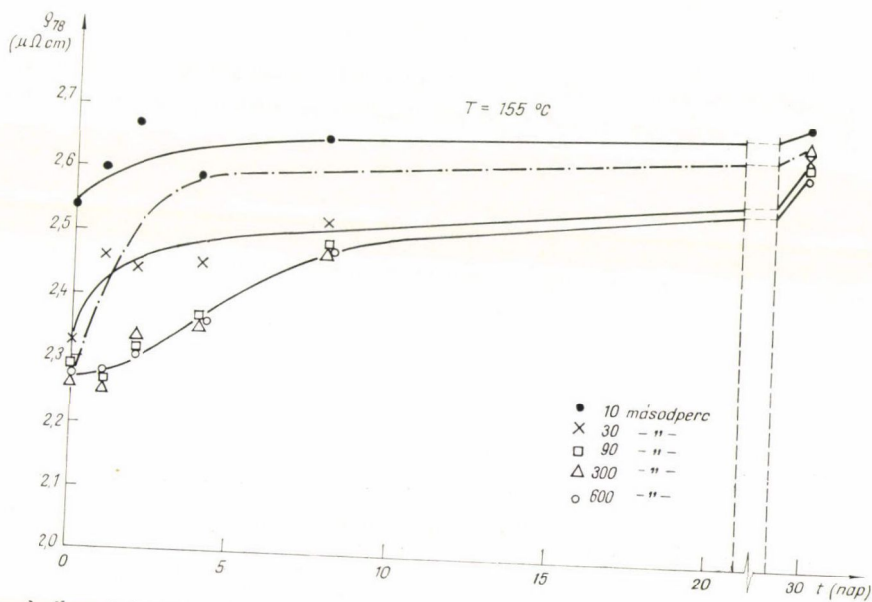
1. ábra. Különböző hőmérsékleten különböző ideig revertált minták ellenállása. A mérések közvetlenül a reverziós kezelés után történtek.

oldatnak megfelelő értékre. Ha növeljük a hűlés idejét, az ellenállás eleinte állandó marad, egy bizonyos, a hűlés hőmérsékletétől függő időtartamon túl azonban esni kezd. 140 °C-os hűlés után az ellenálláscsökkenés kisebb.

A szobahőmérsékleten lejátszódó újraöregedést 30, ill. 90 napig vizsgáltuk. A 170, 155 és 140 °C-on végzett mérések eredményeit a 2—4. ábra mutatja. A 170, ill. 200 °C-on hőkezelt minták görbéinek a jellege hasonló. Mindegyik ábrán feltüntettük a 460 °C-ról edzett minta öregedési görbéjét is.

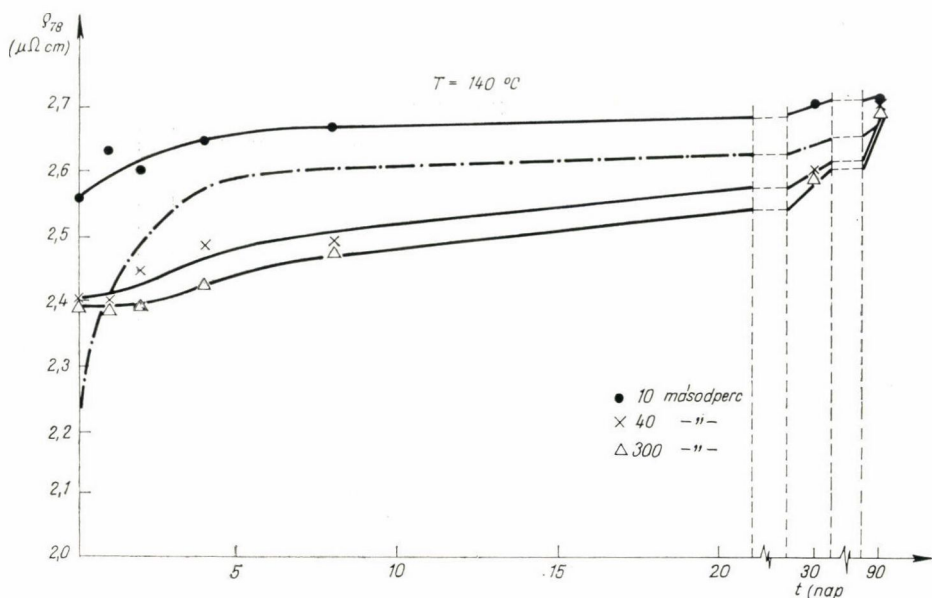


2. ábra. A 170 °C-on különböző ideig revertált minták újraöregedési karakterisztikája.



3. ábra. A 155 °C-on különböző ideig revertált minták újraöregedési karakterisztikája





4. ábra. A 140 °C-on különböző ideig revertált minták újraöregedési karakterisztikája

A 2. ábrából látható, hogy az edzett, valamint a 90 másodpercnél rövidebb hőlkésnek alávetett minták ellenállása 30 nap után azonosra válik, noha az utóbbiaknál az öregedési folyamat lassabban indul. 90 másodpercnél hosszabb időtartamú hőlkések esetén az ellenállásnövekedés annál lassabb és kisebb lesz, minél kisebb volt az ellenállás kezdeti értéke, tehát minél hosszabb ideig tartottuk a mintát a hőlkés hőmérsékletén.

A 155 °C-os hőlkés után kapott öregedési görbéken — amelyeket a 3. ábra mutat — három különböző jelleget figyelhetünk meg:

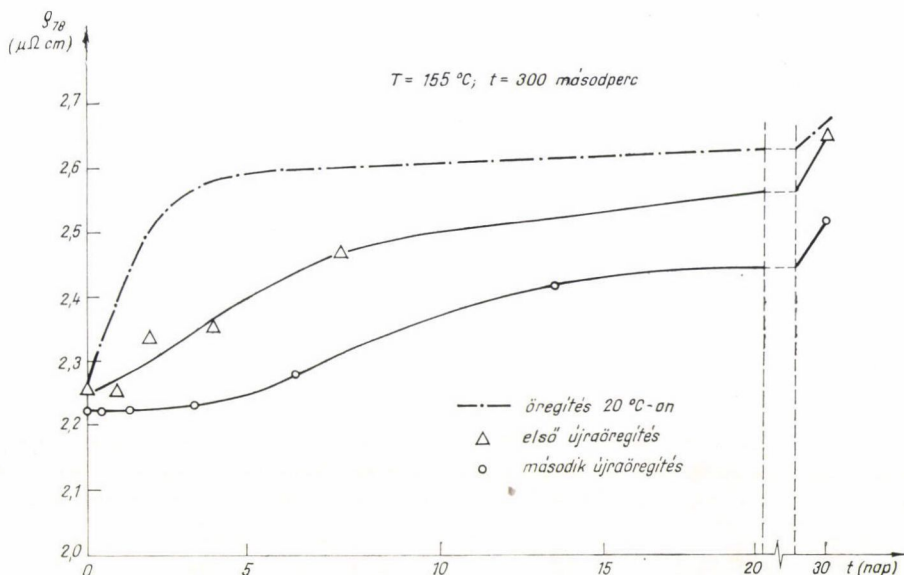
1. A 10 másodperc tartamú hőlkés csak kis mértékben befolyásolja a korábban kialakult szerkezetet. Ez az oka annak, hogy igen rövid idő alatt visszaáll az öregített állapotra jellemző ellenállás érték.
2. A hőlkésnek van egy hosszú periódusa, amely a szilárd oldatnak megfelelő ellenállást eredményezi. Az újraöregedés meglehetősen lassan indul, de 30 nap után az ellenállás eléri az edzett és nemesített mintára jellemző értéket.

A hosszú időtartamú revertáló hőkezelés hatásának vizsgálatára egyórás hőntartást is alkalmaztunk. Megállapítottuk, hogy az egyórás hőlkés nagymértékű ellenállás-csökkenést okoz és az újraöregedés alatt csak kis növekedés tapasztalható az ellenállásban.

A 140 °C-os 10 másodpercnél hosszabb hőlkések ugyancsak azonos ellenállású állapotra vezetnek, de ez az érték nagyobb, mint a szilárd oldat ellenállása. A reverzió után az azonos értékről induló minták közel egyforma sebességgel öregednek és kb. 90 nap alatt ellenállásuk eléri a magas hőmérsékletéről végzett edzés után

nemesített mintákét. A 10 másodperces hőlkés hatására az ellenállás-csökkenés csak igen kis mértékű és az újraöregítés során az ellenállásgörbe az edzetté felett halad.

A 155°-on revertált mintákon végeztünk ismételt reverziót is. Az 5. ábra mutatja az edzett, valamint az egyszer és kétszer revertált minták öregedési karakterisztikáit. Látható, hogy az öregedés sebessége az edzett mintához képest a reverziók számával egyre csökken.



5. ábra. Az edzett, egyszer és kétszer revertált minták öregedési karakterisztikái. A reverzió 155 °C-on történt.

### Diszkusszió

A fenti vizsgálataink azt mutatták, hogy 155 °C-on és efölött 10 másodpercnél hosszabb hőlkés a szilárd oldatnak megfelelő ellenállást eredményez. Ezalatt a hőmérséklet alatt a revertáló hőkezelés után az ellenállás mindig nagyobb marad, mint a szilárd oldaté. Ez azt jelenti, hogy 155 °C alatt csak részleges reverzió van, tehát GP zónák maradnak vissza az ötvözetben, és 155 °C az a hőmérséklet, amely fölött GP zónák nem tudnak fennmaradni.

Az a megállapításunk, hogy szobahőmérsékleti öregítés után a reverzió képes létrehozni szilárd oldatot (legalábbis annyira, amennyire az ellenállásmérés ennek érzékelését lehetővé teszi) azt jelenti, hogy az ötvözetben valódi reverzió jöhet létre [3]. Ezt megerősítik újraöregedési vizsgálataink is, mivel a szilárd oldatra jellemző ellenállásra revertált minták mindig képesek elérni az öregített állapotban kapott ellenállásértéket. A teljes reverzió jelenségét bizonyítják kisszögű röntgenszórás vizsgálataink is [20].

Eredményeink hasonlóságot mutatnak az Al-Zn-Mg és az Al-Cu ötvözet tulajdonságai között. Ez utóbbira *Thomas* az edzett és revertált minták elektron-diffraktogramjainak az összehasonlítása alapján kimutatta, hogy benne a reverzió tökéletesen reprodukálja a szilárdoldat állapotát [16].

Láttuk, hogy  $T_{GP}$  fölött a kiválási folyamatot mindig megelőzi a GP zónák szétesése szilárd oldattá. Ez a megállapítás nincs összhangban *Lorimer* és *Nicholson* modelljével [6]. Eredményeink inkább a *Pashley* modellel magyarázhatók [12]. A szobahőmérsékleti öregítés alatt ugyanis bizonyos idő után állandó számú mag növekszik tovább és nincs növekedés a zónaszám csökkenésének rovására [2]. Az a tény, hogy a szobahőmérsékleten képződött zónák oldódása után keletkezik csak az  $\eta'$  fázis, nem zárja ki annak lehetőségét, hogy a  $T_c$  kritikus hőmérséklet közelében keletkező kisszámú nagyméretű zóna nem képes átalakulni  $\eta'$  fázissá [6]. Feltételezhető, hogy ötvözetünkben a nagy magnéziumfelesleg és a kis Zn koncentráció az oka annak, hogy szobahőmérsékleti öregítés után a reverzió más mechanizmussal történik, mint az irodalomban általában vizsgált Zn/Mg  $\geq 2$  koncentrációjú ötvözetekben. Erre mutatnak *Düinkeloh* és munkatársai legújabb vizsgálatai is [23].

Vizsgálataink erőteljesen arra utaltak, hogy az edzéskor keletkezett vakanciáknak lényeges szerepe van az Al-Zn-Mg ötvözetek reverziós folyamataiban, mivel — mint az 1. ábrából látható — a reverzió igen gyorsan lejártszódik. Ez a nagy sebesség a normális diffúzióval nem magyarázható meg. Ezért vizsgáltuk az újraöregedés és az ismételt újraöregedés sebességét. Ha összehasonlítjuk (1. 5. ábra) az öregedés sebességét az edzett, illetve az egyszer és kétszer revertált mintákban, kézenfekvő a feltételezés, hogy a reverzió során megsemmisült vakanciák felelősek a nemesedési sebesség csökkenéséért. Ez a megállapítás összhangban van *Panseri* és *Federighi* biner Al-Zn [21], illetve *turner* Al-Mg-Si [22] ötvözetben kapott eredményeivel.

### Következtetések

Az Al-3,3 s% Zn-2,4 s% Mg ötvözet vizsgálata során, amely Fe, Si és Ti szennyezőket is tartalmazott, az alábbiakat állapítottuk meg:

1. A szobahőmérsékleten öregített mintát 155 °C fölé hevítve a kiválási folyamatot mindig megelőzi a GP zónák szétesése szilárd oldattá.
2. A szilárd oldatra jellemző ellenállásra revertált minták újraöregedéskor mindig megközelítik a kiindulási, öregített állapotra jellemző értéket.
3. Az 1. és 2. megállapításból következik, hogy a vizsgált ötvözetben adott körülmények között teljes reverzió megy végbe.
4. A reverzió nagy sebessége és az a tény, hogy az újraöregedés lassabban történik, mint az edzett minták öregedése, a vakanciák fontos szerepét mutatja.

### Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetüket fejezik ki *dr. Buray Zoltánnak* szíves közreműködéséért a vizsgálati anyag előállítása terén és a vizsgálatok közben nyújtott hasznos tanácsaiért.



## IRODALOM

1. *M. L. V. Gayler*, *J. Inst. Met.* 28. 213, 1922.
2. *V. Gerold*, *Z. Metallkunde* 45. 593, 1954.
3. *A. Kelly* and *R. W. Nicholson*, *Progress in Mat. Sci.* 10. 151, 1963.
4. *I. J. Polmear*, *J. Inst. Met.* 86. 113, 1957—58; 87. 24, 1958—59.
5. *H. Suzuki*, *M. Kanno* and *S. Asami*, *J. Jap. Inst. Light. Met.* 22. 269, 1972.
6. *G. W. Lorimer* and *R. W. Nicholson*, *Acta Met.* 14. 1009, 1966.
7. *K. Asano* and *K. Hirano*, *Trans. J. I. M.* 9. 24, 1968. 9. 249, 1968. 11. 225, 1970.
8. *A. J. Cornish* and *M. K. B. Day*, *J. Inst. Met.* 97. 44, 1969.
9. *O. Kawano*, *Y. Murakami*, *T. Nakazawa* and *K. S. Liu*, *Trans J. I. M.* 11. 12, 1970.
10. *C. A. Grove* and *G. Judd*, *Met. Trans.* 4. 1023, 1973.
11. *P. A. Thackery* and *A. T. Thomas*, *J. Inst. Met.* 99. 114, 1971.
12. *D. W. Pashley*, *M. H. Jacobs* and *J. T. Vietz*, *Phil. Mag.* 15. 51, 1967.
13. *J. D. Embury* and *R. B. Nicholson*, *Acta Met.* 13. 403, 1965.
14. *W. F. Smith* and *N. J. Grant*, *Met. Trans.* 1. 1735, 1970.
15. *K. G. Kent*, *J. Inst. Met.* 97. 127, 1969.
16. *G. Thomas*: *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, Intersci Publ. John Wiley N. Y. 1963. p. 793.
17. *M. Murakami*, *O. Kwano* and *Y. Murakami*, *Acta Met.* 17. 29, 1969.
18. *T. Federighi* and *G. Thomas*, *Phil. Mag.* 7. 127, 1962.
19. *S. Horiuchi*, *Phil. Mag.* 21. 623, 1970.
20. *G. Groma*, *E. Kovács-Csetényi*, *J. Kovács*, *J. Lendvai* and *T. Ungar*, *Z. Metallkunde* 67. 404, 1976.
21. *C. Panseri* and *T. Federighi*, *Acta Met.* 8. 217, 1960.
22. *C. Panseri* and *T. Federighi*, *J. Inst. Met.* 94. 99, 1966.
23. *K. H. Dünkeloh*, *G. Kralik* and *V. Gerold*, *Z. Metallkunde* 65. 291, 1974.



# A $^{252}\text{Cf}$ SPONTÁN HASADÁSÁNÁL KELETKEZŐ NEUTRONOK ENERGIAELOSZTLÁSA\*

JÉKI LÁSZLÓ

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOM

1. BEVEZETÉS .....	281
2. ELMÉLETI ÁTTEKINTÉS .....	284
2.1. A hasadási folyamat főbb jellemzői .....	285
2.2. Mikroszkopikus modell kísérleti adatok felhasználásával .....	289
2.3. Statisztikus hasadási modell .....	292
2.3.1. Az alapvető formulák levezetése .....	293
2.3.2. A fragmentek közti kölcsönhatás potenciálja .....	294
2.3.3. A hasadási folyamatban felszabaduló $Q$ teljes energia .....	296
2.3.4. A magok nivósűrűsége .....	296
2.3.5. A neutronok energiaeloszlása a tömegközépponti rendszerben .....	299
3. A $^{252}\text{Cf}$ HASADÁSI NEUTRON ENERGIASPEKTRUM MÉRÉSEK ÁTTEKINTÉSE ..	302
3.1. A Maxwell eloszlás $T$ paraméterének meghatározása .....	302
3.1.1. Mérések repülési idő módszerrel .....	303
3.1.1.1. Háttérproblémák repülési idő módszeren alapuló mérésekben .....	303
3.1.1.2. Neutron és késő-gamma sugárzás eloszlások számítása .....	306
3.1.1.3. A mérések diszkussziója .....	308
3.1.2. Mérések más módszerekkel .....	311
3.1.2.1. Mérések fotoemulzióval .....	311
3.1.2.2. Mérés „Bramblett-számláló”-val .....	312
3.1.2.3. Mérés proporcionális számlálóval .....	314
3.1.3. Összefoglalás .....	314
3.2. Elterések a Maxwell eloszlástól .....	315
3.2.1. A spektrum alakja $E_n < 0,5$ MeV energiatartományban .....	315
3.2.2. Retardált neutronok .....	316
4. A MÉRŐRENDSZER LEÍRÁSA .....	320
4.1. Mérő-elektronika .....	320
4.2. Detektorok .....	324
4.2.1. Hasadási detektor .....	324
4.2.2. Neutron detektor .....	325
4.3. Háttér mérések és korrekciók .....	327
5. EREDMÉNYEK ÉS KÖVETKEZTETÉSEK .....	332
6. FÜGGELÉK .....	339

## 1. BEVEZETÉS

Már röviddel a maghasadás jelenségének felfedezése után *Joliot-Curie*, *Ko-warski* valamint *Anderson*, *Fermi* és *Szilárd* kísérleteiből nyilvánvalóvá vált, hogy a nehéz atommagok hasadása folyamán 1-nél több neutron keletkezik. Hatalmas

\* Kandidátusi értekezés, megvédve, 1975. júl. 1.



szellemi és anyagi erő koncentráldott hosszú éveken át a hasadási kutatásokra, azonban ma sem mondhatjuk el, hogy tisztázódott a hasadás fizikájának valamennyi problémája. A maghasadás fizikája, a hasadási folyamatok bonyolultsága miatt felerősítve tükrözi egyrészt a magfizika alapvető problémáját, mellyel egy adott magon, adott energián végbemenő egyetlen reakciótípus leírásánál találkozunk: nem ismerjük a nukleáris kölcsönhatást leíró erőtvényt, másrészt a „néhány száz test-probléma” megoldása lehetetlennek látszó feladatot jelent.

Egyetlen nehéz atommag hasadása során többszáz különféle „szokásos” magreakció valósulhat meg. Kiléphetnek gamma sugarak, neutronok,  $\alpha$  részecskék, könnyű magok a szétszakadás előtt és a szétszakadás után, az összes reakciótípus keletkezési hatáskeresztmetszete függ a hasadó mag gerjesztésétől, függ a hasadásban keletkezett fragmentek tömegszámától, a fragmentek gerjesztési energiájától, általában a fragmenteknek mint gerjesztett magoknak a tulajdonságaitól. A hasadási folyamat ezen lehetséges reakciók komplex sokasága. A folyamat bonyolultsága megnehezíti az egzakt leírást, ugyanakkor lehetővé teszi, hogy a jellemző paraméterek átlagos viselkedését vizsgáljuk.

Az utóbbi néhány évben a kísérleti technika fejlődése már egyre inkább lehetővé tette, hogy információt szerezzünk a hasadásban keletkezett egyes fragmentek tulajdonságairól, valamint az egyes fragmentekből kilépő részecskék tulajdonságairól. Ezek a vizsgálatok már eddig is a hasadási folyamat sok részproblémájára adtak választ, azonban egy egységes, a hasadási folyamat összes jellemzőjéről jól számot adó leírás még nem jött létre.

Dolgozatunkban a hasadási kutatások egy speciális területére, a hasadási neutronok energiaeloszlásának vizsgálatára szorítkozunk. Az első kísérleti eredmények és elméleti leírások az 1950-es évek elején váltak ismeretessé. Ezek a korai vizsgálatok azt mutatták, hogy a laboratóriumi rendszerben a hasadási neutronok energiaeloszlása jól leírható a Watt-eloszlással, illetve egy Maxwell eloszlással [Wa52, Te59]. Később az érdeklődés fő iránya az egyes hasadási termékekből kibocsátott neutronok átlagszámának, szög- és energiaeloszlásának vizsgálata felé fordult, ezzel egy időben megkísérelték a kísérletileg talált erősen tömegszámfüggő paraméterek (mint a hasadási neutronok átlagszáma, átlagos energiája stb.) elméleti értelmezését. Nagyszámú kísérleti adat felhalmozódása után kiderült, hogy a mérési eredmények ellentmondóak és így különféle, részben egymást kizáró elméleti értelmezésre adnak lehetőséget. Változatlanul nyitott kérdés maradt, hogy milyen eloszlással írható le a neutronok energiaeloszlása a tömegközépponti rendszerben, a neutronok szögeloszlása izotrop vagy anizotrop-e a tömegközépponti rendszerben, a neutronok csak a repülő hasadási termékekből lépnek-e ki vagy a szétszakadás során is emittálódnak.

Az 1960-as években indult meg a gyors reaktorok fejlesztése. Nagy,  $\sim 1000$  megawatt teljesítményű gyors reaktorok építésének előkészítésére jelenleg a gyors kritikus rendszerek kiterjedt vizsgálata folyik. Napjainkban a reaktorfizikai számítások olyan fokon állnak, hogy a reaktor-elmélet bizonytalanságai kisebb hibát okoznak a számításokban, mint a felhasználásra kerülő magfizikai adatok bizonytalanságai. A gyors reaktorok és kritikus rendszerek tervezési paraméterei rendkívül érzékenyek a felhasznált magfizikai adatokra. A magfizikai adatok bizonytalansága szovjet szerzők [Za71] becslése szerint  $\pm 0,013$  cent/kWh bizonytalanságot okoz az előállított elektromos energia árában. 1000 MW elektromos teljesítményű reaktor-nál az évi 1—1,5 millió \$-t jelent, azonban ennél sokkal jelentősebb az a tény, hogy



az adatok bizonytalansága miatt fokozott biztonságra törekedve kell megtervezni a reaktort, a „túlbiztosítás” pontos költségkihatásai megbecsülhetetlenek.

Az adatok általános jellemzője, hogy az egyes mérések pontossága már meghaladja a számításokhoz kívánt pontosságot, azonban a különböző módszerekkel mért adatok rendkívül nagy szórást mutatnak, a mérések nagy szisztematikus hibákat tartalmaznak. A hasadási neutronok energiaeloszlása a reaktorfizikai számítások egyik legfontosabb bemenő paramétere. Alapvető ellentmondás áll fenn a mikroszkopikus (differenciális) módszerekkel mért és az integrális fólia aktivációs módszerekkel végzett mérésből számított hasadási neutron energiaeloszlások között. Ugyanakkor a mikroszkopikus módszerrel mért adatok is nagy szórást mutatnak, ezen szórás okának, az esetleges szisztematikus hibáknak a felderítése volt egyik célunk.

A legutóbbi időben kérdésessé vált az egy-paraméteres (Maxwell eloszlás) spektrumleírás használhatósága is, egyes mérések jelentős eltérésekre utalnak. A kis neutron energiák tartományában ( $E_n < 0,5$  MeV) a spektrum többi részét jól leíró Maxwell eloszláshoz viszonyítva 20–30% neutrontöbbletet mutattak ki [Me67]. Más szerzők csúcsokat figyeltek meg a neutron energiaeloszlásban s ezeket a hasadás után 1–10 nsec múlva kilépő „retardált” neutronok léteire vezették vissza [Ne69, Za70].

Jelen dolgozat célja a hasadási neutronok energiaspektruma kisenergiájú tartományának vizsgálata volt. Megmertük a  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező neutronok energiaeloszlását a 0,002–1 MeV energiatartományban. Azért esett a választásunk a spontán hasadó  $^{252}\text{Cf}$  magra, mert a neutron spektrum mérés a reaktorok és gyorsítók mellett fellépő nagy háttér zavaró hatása nélkül, a lehető legtisztább feltételek között hajtható végre. A  $^{252}\text{Cf}$  neutron spektrumára vonatkoztak a Maxwell eloszlásától való eltérésre utaló mérések is.

A dolgozat 2. fejezetében röviden áttekintjük a hasadási neutronok energiaspektruma elméleti leírásának lehetőségeit. Az empirikus formulák ismertetése után megvizsgáljuk, hogyan építhető fel a neutronspektrum az egyes fragmentekből emittált neutronok járulékeként. A fragmentek közti kölcsönhatás potenciáljából kiindulva megmutatjuk, hogy egy statisztikus hasadási modell keretében hogyan számítható a neutronok energiaeloszlása. Ehhez kapcsolódóan részletesebben tárgyaljuk a hasadásban felszabaduló energiának, a magok nívósűrűségének és neutronok tömegközépponti rendszerbeli energiaeloszlásának leírására alkalmazható formulákat, ezeket számításra alkalmas alakra hozzuk.

A 3.1. fejezetben áttekintjük a  $^{252}\text{Cf}$  hasadásnál keletkező neutronok energiaeloszlására vonatkozó korábbi méréseket. Részletesen megvizsgáljuk a Maxwell eloszlás  $T$  paraméterének mért értékeiben jelentkező nagy szórás lehetséges okait. Néhány egyszerű számítás segítségével megbecsüljük a szerzők által figyelembe nem vett, a késő-gamma sugárzás detektálása által okozott spektrumtorzítás nagyságát a repülési-idő elven alapuló mérésekben. Ugyancsak néhány egyszerű számítással megbecsüljük a „Bramblett számláló”-val végzett mérésben fellépő szisztematikus hibákat. Számításaink alapján a neutronok energia spektrumát leíró Maxwell-eloszlás energiaparaméterének legvalószínűbb értéke a 0,5–6 MeV energiatartományban  $T = 1,57$  MeV.

A 3.2. fejezetben áttekintjük a retardált neutronok létezésére utaló kísérleteket. A kísérleti elrendezés és a mérési feltételek analízisével megmutatjuk, hogy a spekt-

rumban megfigyelt csúcsok létezése és az eredményekből levont következtetések a retardált neutronok létezésére vonatkozóan egyaránt kétségesek.

A 4. fejezetben ismertetjük a hasadási neutron spektrum mérésére összeállított, a repülési-idő mérés elvén működő kísérleti elrendezést. Részleteiben ismertetjük a mérőelektronikát, a neutron, ill. hasadási termék detektort, a háttérkérdéseket és korrekciókat, valamint az adatok feldolgozását.

A  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező neutronok energiaszórására vonatkozó mérésünk eredményét az 5. fejezetben, illetve táblázatosan a Függelékben adjuk meg. 3 különböző repülési távolságnál végrehajtott mérésünkkel a 0,002—1 MeV közti energiatartományban határoztuk meg a neutronok energiaszórását. Eredményünk, jó egyezésben a korábbi mérésekkel [Me67], azt mutatja, hogy  $E_n < 0,5$  MeV energiatartományban neutrontöbblet mutatkozik a nagyobb energiáknál jó leírást adó,  $T=1,57$  MeV energiaparaméterrel számolt Maxwell eloszláshoz képest. Megmutatjuk, hogy  $E_n < 1$  MeV energiatartományban a spektrum jól leírható Maxwell eloszlással,  $T=1,3$  MeV energiaparaméterrel. Megállapítjuk, hogy szélesebb energiatartományban nem kielégítő a spektrum egyetlen Maxwell eloszlással történő leírása, gyakorlati célokra jól használható 2 Maxwell eloszlás súlyozott összegével történő leírás. A tömegközépponti rendszerben anizotrop, erősen előreirányuló szögeloszlás feltételezésével végzett számítások a kísérletileg talált neutron energia eloszláshoz hasonló jellegű eloszlást adnak, azonban további kísérletek szükségesek a talált spektrumalak értelmezéséhez.

A 3. és 5. fejezetben foglalt eredményeinkről több közleményben számoltunk be [Jé70, Jé71a—e]. Eredményinket ismertettük 1970-ben a Helsinkiben tartott Nuclear Data for Reactors konferencián és a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség által összehívott szakértői értekezleten is. (Consultants Meeting on the Status of Prompt Fission Neutron Spectra, Vienna 25—27 August, 1971.)

## 2. ELMÉLETI ÁTTEKINTÉS

A maghasadás felfedezése óta számos próbálkozás történt egy egységes, átfogó elméleti leírás létrehozására. A különféle próbálkozások jelentős sikereket értek el a folyamat egységes jellemzőinek elméleti reprodukálásában, azonban egy minden vonatkozásban eredményesen alkalmazható modell megalkotása még nem sikerült.

A folyadékcepp-modell és finomított változatai, alapvető sikereik ellenére, sok esetben nem adnak helyes képet olyan fontos adatokról, mint a fragmentek tömeg-, töltés-, kinetikus energiájának eloszlása, neutron emissziós tulajdonságok stb.

Az elmúlt években sok biztató eredmény született azon próbálkozásokból, amelyek a statisztikus magreakció modellek különböző változatait alkalmazták. Közös vonásuk, hogy jól definiált szétszakadási konfiguráció létezését tételezik fel, ami erős nem-adiabatikus hatások következtében kialakult statisztikus egyensúly következménye.

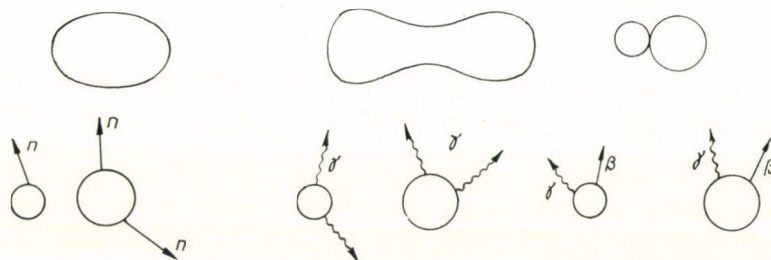
Célkitűzésünk az, hogy egy egységes statisztikus hasadási modell keretében elméleti leírást adjunk a hasadási neutronok energiaspektrumára. Ezért a hasadási folyamat és a neutron kibocsátás mechanizmusának tárgyalásánál csak azon összefüggések és paraméterek meghatározására szorítkozunk, amelyekre a neutronok



energiaeloszlásának számításához szükségünk van. A tárgyalás során részben követjük az elmélet fejlődését, a történeti sorrendet, a teljességre törekvés igénye nélkül. Az elmélet fejlődését nagymértékben befolyásolta a kísérleti technika fejlődése. Ahogyan a kísérletek az összes fragmentre vonatkozó átlagos tulajdonságok méréséről eljutottak az egyes fragmentek és a belőlük emittált részecskék tulajdonságainak vizsgálatához, úgy követte nyomon az elmélet is a maga keretein belül ezt a fejlődést.

### 2.1. A hasadási folyamat főbb jellemzői

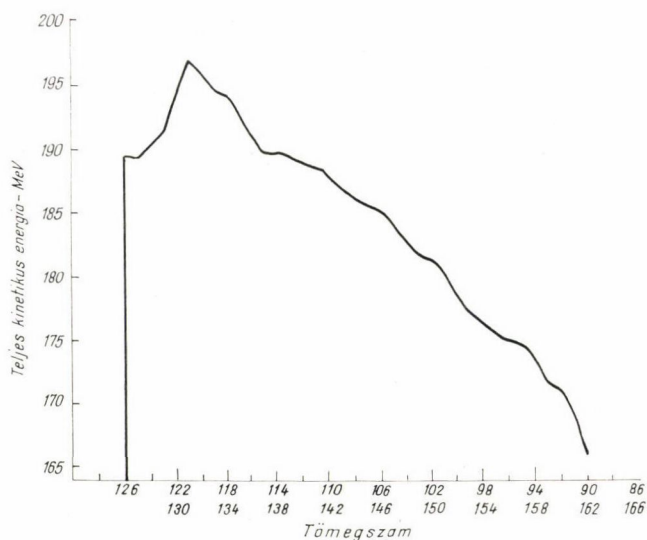
*Hahn és Strassman* 1939-ben fedezte fel, hogy az uránmagok neutronokkal történő besugárzása során közepes tömegszámú atommagok keletkeznek. A jelenség első magyarázatát *Meitner és Frisch* adta meg. Az urán mag a neutron befogása után oszcillálni kezd, vékony nyak alakulhat ki. Ha a két fél közti Coulomb taszítás energiája meghaladja a felületi feszültséget, a mag két nagyjából azonos tömegű termékre hasad szét. A szétszakadás következtében jelentős, kb. 200 MeV energia szabadul fel. A stabil, közepes tömegszámú magoknál a neutron/proton arány kisebb mint a hasadó magoknál, ezért a hasadási termékek neutronfelesleggel rendelkeznek. A neutronfelesleg részben neutron kibocsátással, részben sorozatos  $\beta^-$  bomlással szűnik meg. Már az első kísérletek során megállapították, hogy az uránmag hasadása során 1-nél több neutron keletkezik, felmerült a láncreakció gondolata. Hasadás nemcsak neutronokkal, hanem töltött részecskékkel és gamma sugarakkal is előidézhető, a nehéz atommagok spontán hasadására is képesek. A spontán hasadás az  $\alpha$ -bomláshoz hasonló kvantum mechanikai effektus.



1. ábra

Az 1. ábrán látható képsorozattal próbáljuk illusztrálni a hasadás időbeli lefolyását. A hasadás minden részjelenségre kiterjedő figyelemmel történő áttekintése meghaladja jelen értekezés kereteit. Célunk az, hogy a hasadási neutronok kilépésének okát, mechanizmusát, a neutronok energiaeloszlását leírjuk.

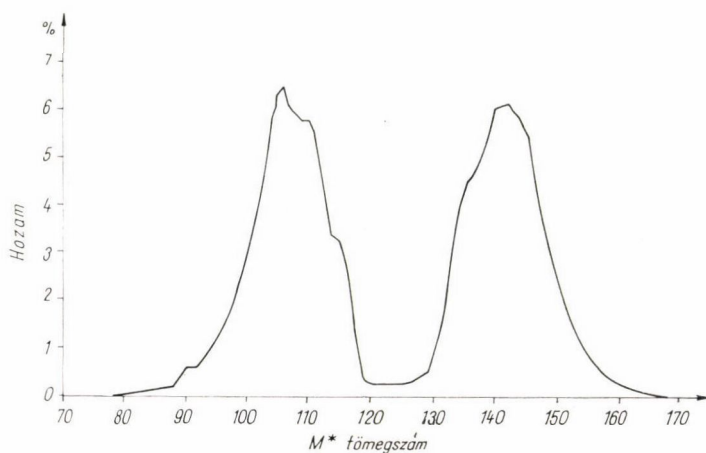
A hasadás során felszabaduló energia nagy része a hasadási termékek kinetikus energiájává alakul át, míg a fennmaradó energia a hasadási termékek gerjesztésére fordítódik. Mérésekkel meghatározták a hasadási termék párokra jutó teljes kinetikus energia eloszlását a tömegarány függvényében. A 2. ábrán látható a fragment-párokra jutó legvalószínűbb teljes kinetikus energia a párok tömegszámának függvényében [Jo70] mérései alapján. A maximális kinetikus energia 1,2 tömegaránynál jelentkezik. Szimmetrikus hasadás esetén lecsökken a hasadási termékek teljes



2. ábra

kinetikus energiája. Szimmetrikus hasadásánál a hasadási termékek nukleonszáma tvool van a mágikus számoktól, így a hasadási termékek a szétszakadás pillanatában erősen deformáltak, a köztük fellépő Coulomb tasztítás kisebb, mint a kevésbé deformált magoknál.

Mérésekkel meghatározták a hasadási termékek tömegeloszlását is. A korai mérések a neutron kibocsátás és  $\beta^-$  bomlások után létrejött stabil magok tömegeloszlását határozták meg. Sokparaméteres mérésekkel meghatározható a neutron-kibocsátás előtti tömegeloszlás is. A  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező hasadási termékek tömegeloszlása látható a 3. ábrán [Jo70] mérései alapján. Szembetűnő,



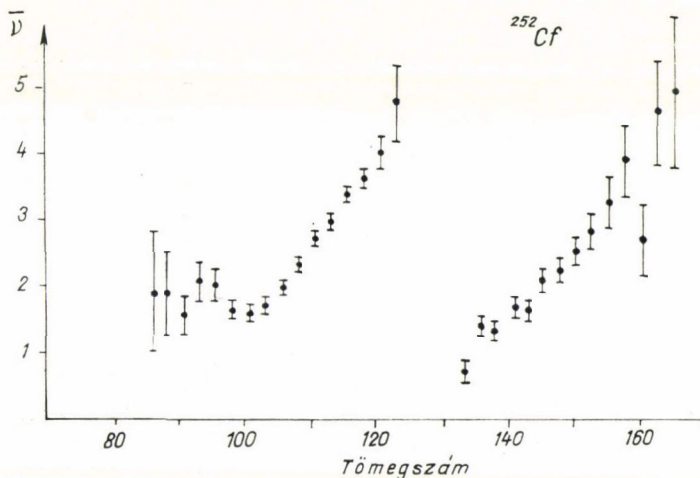
3. ábra

hogy a szimmetrikus hasadásnak megfelelő tömegértéknél mély minimum van, aszimmetrikus hasadás történik. A megfigyelt tömegeloszlás jól leírható egy statisztikus hasadási modell keretében, a magok héjszerkezetének figyelembevételével. A rendszer végállapotainak valószínűségeloszlását a nívósűrűségek határozzák meg. A legvalószínűbb hasadási mód akkor adódik, ha a két hasadási termék nívósűrűségeinek szorzata a legnagyobb értékét veszi fel.

A hasadási termékek töltéseloszlásáról kevés mérési adat áll rendelkezésre. Adott tömegszámnál a legvalószínűbb töltés eloszlása Gauss eloszlás. A maximális hozamú hasadási termékeknek a hasadó mag és a hasadási termékek töltéssűrűsége különböző. A könnyű fragment nagyobb, a nehéz kisebb töltéssűrűségű mint a hasadó mag. Ez az effektus is a héjszerkezet hatására utal.

A hasadási termékek gerjesztett állapotban vannak szétrepüléskor és neutronfelesleggel rendelkeznek. A gerjesztési energia jelentős részétől neutronok kibocsátása révén szabadulnak meg. A hasadási termékek és a belőlük kilépő neutronok szögkorrelációjának vizsgálatából arra következtettek, hogy a neutron kibocsátási idő felső határa  $4 \times 10^{-14}$  sec. Ezeket a neutronokat nevezzük prompt neutronoknak, míg a  $\beta^-$  bomlásokat követő, nagyságrendekkel később kilépő neutronok a késő (delayed) neutronok.

A hasadási neutronok tulajdonságait leíró paraméterek egyik legfontosabbika a hasadási aktusonként kibocsátott neutronok átlagos száma ( $\bar{\nu}$ ). A mérési adatokból megállapítható, hogy a gerjesztési energia növelésével növekszik a kibocsátott neutronok száma.  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál kibocsátott neutronok átlagszámának elfogadott értéke  $\bar{\nu}=3,77$  [Ko70]. Fraser és Milton [Fr54] határozta meg először kísérletileg az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok számát, a neutronok számának tömegszámfüggését,  $\nu(A)$ . Eredményül az adódott, hogy a hasadási neutronok legnagyobb valószínűséggel a legnehezebb könnyű és a legnehezebb nehéz hasadási termékekből lépnek ki, a neutrons szám a tömegszám függvényében „fűrészfog” eloszlást mutat. (A 4. ábrán látható a  $\nu(A)$  eloszlás  $^{252}\text{Cf}$  esetére [St65] mérései



4. ábra



alapján.) A különböző hasadó magokra kapott  $v(A)$  eloszlásokat összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy az eloszlások hasonlóak. A hasadási termékek gerjesztettsége maguknak a hasadási termékeknek a tulajdonságaitól függ, a hasadó mag tulajdonságai kevésbé játszanak szerepet. Mágikus neutron vagy protonszámú hasadási termékekből nem lépnek ki neutronok, míg a magas gerjesztési energiájú, a mágikustól távoleső nukleonszámú magokból sok neutron lép ki.

A hasadási neutronok energiaeloszlását ismertető első, 1952-ben megjelent közlemények [Ne52, Wa52, Hi52, Bo52] 1946–47-ben elvégzett méréseket ismertettek. Az első mérésekkel egy időben próbálkozások történtek az energiaeloszlás leírására, elméleti értelmezésére. Természetesen még nem ismerték a korábban ismertetett olyan hasadási mennyiségek, mint a tömeg- és töltéseloszlás, kinetikus energia, átlag neutron szám erős tömegszámfüggését, ezért egy jellemzőnek vélt, átlagos hasadási termék adataival számoltak. Az alábbiakban ismertetendő, a hasadási neutronok laboratóriumi (LAB) rendszerbeli energiaeloszlását leíró formulák egy része ma már csak történeti érdekesség, a teljesség kedvéért idézzük őket.

*Feather* feltételezte, hogy a neutronok energiaeloszlása a tömegközépponti rendszerben (TKR) a párolgási formulával írható le:

$$\varphi(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{T^2} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right), \quad (1)$$

ahol  $\varepsilon$  a neutronok energiája a TKR-ben,

$T$  a fragmentek maghőmérséklete.

Az (1) párolgási spektrumot a LAB rendszerben transzformálva a Feather formula adódik:

$$N(E) = \frac{\pi^{1/2}}{8E_f^{1/2}T^{1/2}} \{F[(2E/T)^{1/2} + (2E_f/T)^{1/2}] - \\ - F[(2E/T)^{1/2} - (2E_f/T)^{1/2}]\} \quad (2)$$

és

$$F(x) = -2x(2\pi)^{-1/2} \exp(-x^2/2) + (2\pi)^{-1/2} \int_{-x}^x \exp(-t^2/2) dt,$$

ahol  $E$  a neutronok energiája a LAB rendszerben és

$E_f$  az egy nukleonra eső kinetikus energia.

Az eloszlásból meghatározhatjuk az  $\bar{E}$  átlagenergia értékét:

$$\bar{E} = \int_0^\infty EN(E) dE \quad (3)$$

$$\bar{E} = E_f + 2T. \quad (4)$$

*Watt* [Wa52] a párolgási spektrum helyett Maxwell eloszlást tételez fel a tömegközépponti rendszerben:

$$\varphi(\varepsilon) = \frac{2}{\pi^{1/2}T^{3/2}} \varepsilon^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right), \quad (5)$$

ahol  $T$  az eloszlás energiaparamétere, nem maghőmérséklet a Weisskopf-féle statisztikus modell értelmezésében. Az eloszlást a LAB rendszerbe transzformálva a Watt-formula adódik:

$$N(E) = \left[ \exp\left(-\frac{E_f}{T}\right) / (\pi E_f T)^{1/2} \right] \exp\left(-\frac{E}{T}\right) \cdot \sinh[2(EE_f)^{1/2}/T]. \quad (6)$$

Az átlagenergia:

$$\bar{E} = E_f + \frac{3}{2} T. \quad (7)$$

Már 1943-ban felvetődött, hogy a neutronok energiaeloszlása a LAB rendszerben leírható a Maxwell eloszlással:

$$N(E) = \frac{2}{\pi^{1/2} T^{3/2}} E^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{T}\right). \quad (8)$$

Az átlagenergia:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} T. \quad (9)$$

Terrel [Te59] mutatta meg, hogy sok, a TKR-ben párolgási spektrummal leírt eloszlás összege a LAB rendszerben Maxwell eloszlásnak felel meg. „Véletlen, de szerencsés eredmény” (Terrel).

Az 1960-as években, háttérbe szorítva a korábban előszeretettel alkalmazott Watt formulát, általánossá vált a mért neutron energiaeloszlások Maxwell eloszlással történő leírása. A mérések eredményeként  $T$  energiaparaméter vagy az átlagenergia értékét adták meg. A hasadási neutron energiaspektrum mérések általában a 0,5–6 MeV neutronenergiatartományt vizsgálták, ebben az energiatartományban a Maxwell eloszlás jól leírja a kísérleti eredményeket.

## 2.2. Mikroszkopikus modell kísérleti adatok felhasználásával

Az előzőekben vázlatosan ismertettünk néhány fontos kísérleti eredményt. A folyamat megértéséhez a különböző, mérésekből már ismert jellemzők egységes keretbe foglalására, elméleti leírására lenne szükség. Azonban a hasadási folyamat összetettsége miatt ma még nem várhatjuk az elméleti leírástól, hogy egyidejűleg jól számot adjon a hasadás minden jellemzőjéről. Egy-egy részprobléma vizsgálatánál, kísérleti adatok számításokkal történő összevetésénél célszerű olyan számításokat végezni, ahol az ismeretlen paraméterek számát a minimumra csökkentjük. A neutronok energiaspektrumának számítására olyan modellt mutatunk be, melynek keretében csak a neutronok TKR-beli energiaeloszlására vonatkozóan kell feltevésekkel élnünk, a számításokhoz szükséges többi mennyiségre a kísérletileg meghatározott értéket fogadjuk el.

A kísérleti technika fejlődése (félvezető detektorok, sokparaméteres mérések számológép segítségével) az 1960-as évek elejére már lehetővé tette, hogy a hasadásnál keletkező mintegy 80 különböző tömegű fragment átlagos tulajdonságainak vizsgálata helyett kísérletileg meghatározzuk bármely fragment, illetve a belőle

kibocsátott részecskék tulajdonságait. Az egyes fragmentekre vonatkozó adatok birtokában megkíséreljük „félempirikusan” meghatározni a hasadási neutronok energiaszórását is. A „félempirikus” kifejezéssel azt kívánjuk jelezni, hogy részben elméleti feltevések, részben mérési adatok felhasználásával építjük fel a neutron spektrumot.

Tekintsük át röviden, hogyan építhető fel az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok eloszlásából a LAB rendszerben mért totális neutron spektrum. (Totális neutron spektrumon a szövekre és a különböző  $A$  tömegszámú fragmentekre összegezett eloszlást értjük.) Az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok eloszlására feltevéssel kell élnünk. Az alapvető feladat ezeknek az eloszlásoknak a meghatározása. A TKR-beli neutron energiaszórások sok paraméterről függenek: a hasadási termékek kezdeti gerjesztési energiájától ( $U_i$ ), a neutronok és protonok számától ( $N, Z$ ), a spinektől stb. Legyen  $\Phi$  a neutronok tömegközépponti rendszerbeli energiaszórását leíró függvény [K171]:

$$\Phi(\varepsilon, \vartheta, U_i, N, Z, E_k), \quad (10)$$

ahol  $\varepsilon$  és  $\vartheta$  a neutronok TKR-beli eloszlását jellemző energia és szög. Az  $E_k$  kinetikus energia kapcsolatban áll a hasadásnál felszabaduló  $Q$  teljes energia és az  $U_i$  kezdeti gerjesztési energiával:

$$Q = E_k + U_i. \quad (11)$$

A TKR  $\rightarrow$  LAB transzformáció végrehajtása során a (10) eloszlásokat egyenként kell áttranszformálni, az adott hasadási termék kinetikus energiájának figyelembevételével. Az  $\varepsilon$  TKR-beli neutron energia és az  $E$  LAB rendszerbeli neutron energia közti kapcsolat:

$$E = E_f + \varepsilon + 2\sqrt{E_f\varepsilon} \cos \vartheta, \quad (12)$$

ahol  $E_f$  az egy nukleonra eső kinetikus energia ( $E_k/A$ ). Könnyen belátható, hogy a  $\Phi(\varepsilon)$  eloszlásokat a LAB rendszerbe transzformálva az alábbi  $N(E)$  eloszlás adódik:

$$N(E) = \frac{(\sqrt{E} + \sqrt{E_f})^2}{(\sqrt{E} - \sqrt{E_f})^2} \frac{\varphi(\varepsilon) d\varepsilon}{4(E_f \cdot \varepsilon)^{1/2}} \quad (13)$$

Legyen a LAB rendszerbe transzformált eloszlás

$$N(E, \Theta, U_i, N, Z, E_f). \quad (14)$$

Ekkor a neutron spektrum a LAB rendszerben:

$$N(E, \Theta) dE d\Theta = \sum_{N,Z} \int_{U_i} \varrho(U_i, E_k, N, Z) N(E, \Theta, U_i, N, Z, E_k) dU_i dE d\Theta, \quad (15)$$

ahol a  $\varrho$  függvény az  $(U_i, E_k, N, Z)$  mennyiséggel jellemzett hasadási termék előfordulási valószínűségét írja le. A neutron és protonszámra való összegezést helyettesítsük az  $A$  tömegszámra való összegezéssel ( $A = N + Z$ ). Közelítésünk a töltésszórás elhanyagolásának felel meg:

$$N(E, \Theta) dE d\Theta = \sum_A \int_{U_i} \varrho(U_i, E_k, N, Z) N(E, \Theta, U_i, N, Z, E_k) dU_i dE d\Theta. \quad (16)$$



Kluge [K171] a hasadási termékek  $U_i$  kezdeti gerjesztési energiájának eloszlását a kezdeti gerjesztési energia átlagértékével helyettesítette, (16) átírható:

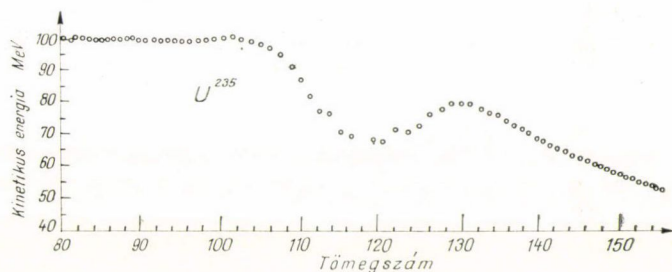
$$N(E, \Theta) dE d\Theta = \sum_A \varrho(\bar{U}_i, \bar{E}_k, A) N(E, \Theta, \bar{U}_i, A, E_f) dE d\Theta. \quad (17)$$

Feltételezzük, hogy a neutronok szögeloszlása izotrop a TKR-ben (az anizotrop eset tárgyalására az 5. fejezetben térünk ki), a LAB rendszerbeli totális neutron spektrum meghatározásakor pedig összegezzük a szögekre, így formuláink a továbbiakban nem tartalmaznak szögfüggést.

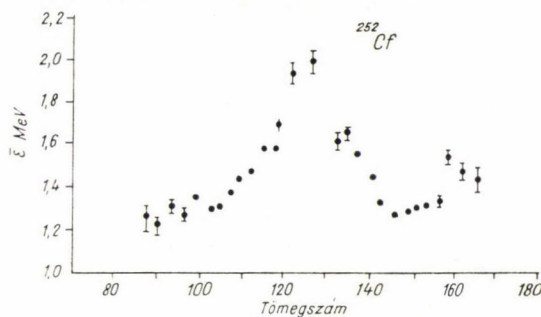
Kluge megmutatta, hogy az adott gerjesztési energiájú, kinetikus energiájú és tömegszámú hasadási termék előfordulásának valószínűsége felírható, mint az adott  $A$  tömegszámú hasadási termék  $p_A$  hozamának és a belőle kibocsátott neutronok  $\nu_A$  számának szorzata:

$$\varrho(\bar{U}_i, \bar{E}_k, A) \sim p_A \cdot \nu_A. \quad (18)$$

Fordítsuk figyelmünket az  $N(E, \bar{U}_i, A, E_f)$  ismeretlen függvény meghatározására. Az  $E_f$  egy nukleonra eső kinetikus energia értékére a TKR—LAB transzformáció végrehajtásához van szükségünk.  $E_f$  a fragmentpárokra jutó teljes kinetikus energia ismeretében (2. ábra), az impulzus megmaradását figyelembe véve egyszerűen adódik. Az 5. ábrán láthatók  $^{235}\text{U}$  termikus neutronokkal előidézett hasadása esetére  $E_f$  értékei a tömegszám függvényében [Mi62].



5. ábra



6. ábra

A 2.3.5. fejezetben részletesen ismertetjük a  $\Phi$  TKR-beli neutron energiaeeloszlás leírására levezethető különböző formulákat. A formulák közös jellemzője, hogy egyetlen  $T$  energiaparaméterrel írják le az energiaeeloszlást. A formulák különböző  $T$  és  $E$  függést tartalmaznak attól függően, hogyan származtatják a kezdeti gerjesztési energiából  $T$  értékét. Adott alakú eloszlás feltételezése esetén egyértelmű kapcsolat van  $T$  és az átlag energia értéke között. A 4, 7, 9 egyenletek adják meg a LAB átlagenergia és  $T$  kapcsolatát, a TKR-ben a kapcsolat:

$$\text{párolgási spektrum} \quad \bar{\varepsilon} = 2T$$

$$\text{Maxwell spektrum} \quad \bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} T.$$

Az  $\bar{\varepsilon}$  neutron átlagenergia értéke kísérletileg ismert a különböző hasadási termékekre vonatkozóan, *Bowman* és munkatársai [Bo62] sokparaméteres méréseikből analizálták ki a 6. ábrán bemutatott  $\bar{\varepsilon}(A)$  eloszlást.

### 2.3. Statisztikus hasadási modell

A hasadási hatáskeresztmetszetben megfigyelt küszöbök leírására *Bohr* és *Wheeler* kidolgozta a csepp modellt és megmutatta, hogy a csepp modell alapján a deformáció függvényében nyeregponthoz vezet a potenciális energiában. *Strutinsky* az egy-részecske állapotok figyelembevételével tisztázta a nyereg szerkezetét, megmutatta, hogy az első maximum után újabb minimum lép fel a potenciális energiában nagy deformációknál (double-humped barrier). A nyeregponthoz felelő magas gerjesztési energiák esetében feltételezhető, hogy a közbenső mag különböző lehetséges konfigurációi erősen keverednek és statisztikusan egyensúlyban vannak egymással. A közbenső mag meglehetősen stabil rendszer, mely csak adott idő eltelté után hasad szét, még magasan a nyeregponthoz fölé eső gerjesztések esetében is (az átlagos hasadási élettartam kísérleti értéke:  $10^{-11}$ – $10^{-15}$  sec). A bonyolult hasadási reakció leglényegesebb vonásainak leírását különböző feltevések alapján felállított modellek segítségével kísérlethetjük meg, majd a kísérleti eredményekkel való összehasonlítás révén ellenőrizhetjük kiindulási feltevéseink helyességét.

A statisztikus hasadási modell szerint a nem-adiabatikus folyamatok eredményeként statisztikus egyensúly alakul ki a különböző hasadási módusok között. A modell jól definiált szétszakadási (scission) állapot létezését tételezi fel. Így egy adott konfigurációjú végállapotra vezető hasadás valószínűsége arányos a szétszakadás pillanatában létező állapotsűrűségekkel. Ez az egyik legjelentősebb kvantitatív hasadási modell, amely figyelembe veszi a magok héjszerkezetét és a kísérletekkel jól egyező számítási eredményeket ad csaknem az összes megfigyelhető hasadási jelenségre. A jól definiált modellnek nincs szabad paramétere, azonban erősen érzékeny a bevitt adatokra, melyek egy része csak közvetve ellenőrizhető extrapolációk eredménye (nívósűrűség, tömegformulák).

A továbbiakban *Ericson* [Er60], *Facchini*, *Erba*, *Saetta*—*Manichelli* [Er66, Fa70], *Kluge*, *Lajtai* [Kl68, Kl69] munkái alapján a teljességre törekvő igénye nélkül megvizsgáljuk, hogyan számítható a hasadási neutronok energiaspektruma egy statisztikus hasadási modell keretében.



## 2.3.1. Az alapvető formulák levezetése

A „részleges egyensúly” (detailed balance) elve alapján egy  $a$  állapotból  $b$  állapotba vezető átmenet  $w_{ab}$  valószínűsége és az inverz átmenet  $w_{ba}^*$  valószínűsége közti kapcsolat:

$$\varrho_a w_{ab} = \varrho_b w_{ba}^*,$$

ahol  $\varrho_a, \varrho_b$  az állapotsűrűségek [B153].

A részleges egyensúly elvének alkalmazása bonyolult a magasan gerjesztett compound mag esetében, melyben sok széles, egymást átfedő nívó van. Ez esetben  $w_{ab}$  a  $\Gamma$  szélességnek megfelelő energiaintervallumra átlagolt átmeneti valószínűséget jelenti. ( $\Gamma$  az élettartamnak megfelelő energiabizonytalanságból származtatható szélesség.) Ha több állapot van a  $\Gamma$  szélességen belül,  $w_{ab}$  meghatározása általában bonyolult, mivel a mátrixelemek között interferencia tagok lépnek fel, azonban a compound mag tulajdonságai alapján várható, hogy a fázisok véletlenszerűen oszlanak el a mátrix elemekben. (A fázisok véletlen eloszlása a statisztikus modell alapfeltevése.)

A modell alapfeltevéseiből a statisztikus hipotézist és a megfordíthatóság elvét kihasználva felírhatjuk a hasadási valószínűséget. Adott  $A_1Z_1$ – $A_2Z_2$  fragmentpárra vezető hasadás  $P_{12}$  relatív valószínűsége rögzített  $E_{\text{kin}}^{\text{tot}}$  totális kinetikus energia és  $U_1, U_2$  fragment gerjesztési energiák mellett arányos a fragmentek  $\varrho(U_i)$  állapotsűrűségével és a  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$  penetrabilitási faktoral, amely a 2 fragment megfelelő compound maggá összekeverését írja le (az inverz, fúziós folyamat valószínűsége):

$$P_{12}(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}, U_1, U_2) \approx T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}) \varrho_1(U_1) \varrho_2(U_2). \quad (20)$$

A hasadásnál felszabaduló  $Q_{12}$  teljes energia:

$$Q_{12} = E_{\text{kin}}^{\text{tot}} + U_1 + U_2, \quad (21)$$

ebből

$$U_2 = Q_{12} - U_1 - E_{\text{kin}}^{\text{tot}}. \quad (22)$$

A teljes kinetikus energia spektruma meghatározható, (22) figyelembevételével integrálva (20)-t:

$$P_{12}(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}) \approx T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}) \int_0^{Q_{12} - E_{\text{kin}}^{\text{tot}}} \varrho_1(U_1) \varrho_2(Q_{12} - E_{\text{kin}}^{\text{tot}} - U_1) dU_1. \quad (23)$$

Az adott fragmentpárra vonatkozó teljes hasadási valószínűség (23) integrálásával adódik:

$$P_{12} \approx \int_0^{Q_{12}} dE_{\text{kin}}^{\text{tot}} \left\{ T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}) \int_0^{Q_{12} - E_{\text{kin}}^{\text{tot}}} \varrho_1(U_1) \varrho_2(Q_{12} - E_{\text{kin}}^{\text{tot}} - U_1) dU_1 \right\}. \quad (24)$$

A fragmentek töltéseloszlása megkapható, ha (24) alapján számoljuk a hasadási valószínűséget rögzített  $A$  mellett különböző  $Z$  értékekre. A töltéseloszlásból  $Z$ -re való összegzéssel a tömegeloszlás közvetlenül adódik:

$$p_A = \sum_Z P_{12}(Z)_A. \quad (25)$$



A (23) formulával leírt kinetikus energia spektrum és a (25) által leírt tömegeloszlás meghatározása után az emittált neutronokat leíró paraméterek meghatározására szorítkozunk.

A szétszakadás előtti pillanatban termikus egyensúlyt ( $T_1 = T_2$ ) feltételezve a fragmentek között [K168], a fragmentek gerjesztési energiája a nívósűrűség-eloszlásokból nyerhető:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{d}{dU} \ln \varrho_1(U) \Big|_{U=U_1} = \frac{d}{dU} \ln \varrho_2(U) \Big|_{U=U_2} = \frac{1}{T_2}. \quad (26)$$

A 2 fragment összes gerjesztési energiája a kinetikus energia ismeretében (21)-ből számolható, ezzel (26)-ból adódik a fragmentek  $U_i$  gerjesztési energiája. Mint már megmutattuk, a kaszkádban kibocsátott neutronok  $\Phi_A(\varepsilon, T_A)$  energiaeloszlására tett feltevések után egyértelmű kapcsolat van a neutronok átlagenergiája és a maghőmérséklet között:

$$\bar{\varepsilon}_A = \bar{\varepsilon}(T_A). \quad (27)$$

A neutronok átlagenergiájának ismeretében egyszerű energiaegyenletből számítható az átlag neutrons szám:

$$v_A = \frac{U_A - E_A^\gamma}{\bar{\varepsilon}_A + \bar{E}_{bA}}, \quad (28)$$

ahol  $E_A^\gamma \approx \frac{1}{2} \bar{E}_{bA}$  a fragmentekből a neutron kibocsátás előtt kilépett  $\gamma$  sugarak átlagenergiája.

A totális hasadási neutron energia spektrumot leíró (19) formula kiértékeléséhez tisztán elméleti úton, a statisztikus modell keretein belül előállítottuk a szükséges mennyiségeket. Továbbiakban a formulákat számításra alkalmas alakra hozzuk, konkretizáljuk a  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$ ,  $\varrho(U)$ ,  $Q_{12}(A)$ ,  $\Phi_A(\varepsilon)$  függvények alakját.

### 2.3.2. A fragmentek közti kölcsönhatás potenciálja

$T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$  adja meg egy  $E_{\text{kin}}^{\text{tot}}$  energiájú és  $U = U_1 + U_2$  teljes gerjesztési energiájú  $A_1 - A_2$  fragmentpár compound maggá összeolvadásának valószínűségét. Egy egyszerű modell keretében a két fragmentet két kölcsönható részecskének tekintjük és kölcsönhatásukat a  $V(r)$  kététest potenciállal írjuk le a két fragment centrumainak  $r$  távolsága függvényében.  $V(r)$  reprezentálja az  $A_1 + A_2$  nukleon rendszer energiáját a fúzió folyamán. A potenciál a magok közeledésére elér egy maximumot majd csökken az összeolvadás tartományában, tehát  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$  a potenciálgáton való áthaladás valószínűségét írja le. A  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$  és  $V(r)$  közötti kapcsolat WKB közelítésben:

$$T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}) = \exp \left( -\frac{2}{h} \int \sqrt{2M(V(r) - E_{\text{kin}}^{\text{tot}})} dr \right), \quad (29)$$

ahol  $M$  a két fragment redukált tömege, az integrálás a potenciálgát vastagságára terjed ki.

Empirikus kifejezést kaphatunk  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$ -re, ha a mért kinetikus energia spektrumokat összevetjük a statisztikus modellből levezetett (23) formulával. A (23) for-

mulában a nívósűrűség jól számítható az ismert paraméterekkel, így a formula és a mérések összevetéséből adódik a  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$  faktor  $E_{\text{kin}}^{\text{tot}}$  függvényében. A számítások részletes ismertetése nélkül álljon itt az empirikusan nyert  $T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}})$  függvény:

$$T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}}) = T(E_{\text{kin}}^{\text{tot}*}) e^{\varphi^* (E_{\text{kin}}^{\text{tot}} - E_{\text{kin}}^{\text{tot}*}) + \frac{\Psi}{2} (E_{\text{kin}}^{\text{tot}} - E_{\text{kin}}^{\text{tot}*})^2}$$

és

$$\varphi^* = \frac{a}{\bar{U}'} - \frac{7}{4\bar{U}'}, \quad \Psi = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a}{\bar{U}'^2} - \frac{1}{\sigma^2}}, \quad (30)$$

ahol  $E_{\text{kin}}^{\text{tot}*}$  a kinetikus energia maximális értéke,  $a$  nívósűrűség paraméter,  $\bar{U}'$  a párenergiaival korrigált fragment gerjesztési energiák átlagértéke,  $\sigma^2$  spinfüggő paraméter. (Részletes ismertetését a nívósűrűség eloszlásának vizsgálatánál adjuk meg.)

Célkitűzésünkhöz, a hasadási neutronok energiaspektrumának kiszámításához meghatároztuk a potenciálgát áteresztőképességét. Vizsgáljuk meg, hogy a potenciálgát áteresztőképességéből milyen következtetések vonhatók le magára a potenciálra vonatkozóan. A potenciál közelítő alakja néhány további egyszerűsítő feltevéssel (29)-ből számolható, az eredmény a 7. ábrán látható. A potenciál első közelítésben parabola alakú, maximuma kb. 210 MeV. A Coulomb potenciál a végtelenben 0-ról indulva 20–22 ferminél éri el a 150 MeV erősséget, a hosszú hatótávolságú vonzó nukleáris kölcsönhatások 20–22 fermi távolságnál kezdenek hatni (vibráció, deformáció). A fragmentek további közeledésére a vonzó magerők kompenzálják a taszító Coulomb kölcsönhatást, a potenciál alakja lapos. A távolság további csökkenésére a fragmentek már szorosabb kapcsolatba kerülnek, erős taszító magkölcsönhatások lépnek fel, a potenciál növekszik és 15 ferminél éri el maximumát. Hasonló tulajdonságú potenciálok létezését nehézion ütközésekben már kimutatták ( $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$ ). A potenciálgörbe további menetét a folyamat megfordíthatóságának elvét kihasználva írhatjuk fel. A potenciál csökkenése a compound mag tartományban valószínűleg a héjak újrendeződésének következménye. A teljes potenciál:

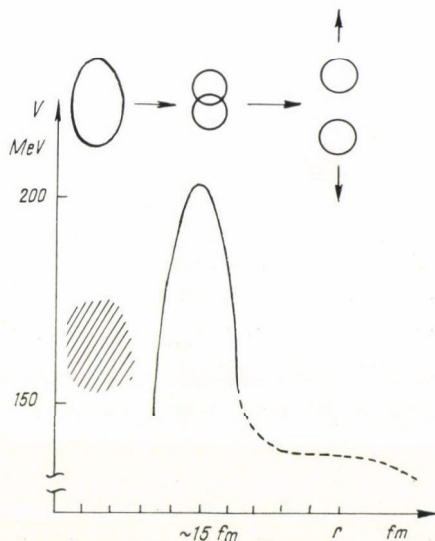
$$V = V_C + V_N + V_R,$$

ahol  $V_C$  a Coulomb potenciál, erőssége kb. 200 MeV,

$V_N$  a vonzó magerők járuléka kb. 30 MeV erősséggel és

$V_R$  a magerők taszító részének járuléka mintegy 50–70 MeV erősséggel.

Láthatjuk, hogy a kölcsönhatási potenciál egzakt formájának és erősségének ismerete nélkül a felvetett probléma tisztán elméleti úton nem oldható meg. Magára



7. ábra



a potenciálra az empirikusan nyert potenciálgát áteresztőképességből következtünk s az így levezetett potenciál erősen függ kiinduló feltevéseinkből, a következtetések lényegében kvalitatívek. Nyilvánvaló, hogy a sok nukleonból álló fragmentek nem tekinthetők belső szerkezet nélküli részecskének. Egyik alapvető kiindulási feltevésünk, a folyamat megfordíthatóságának elve is vitatható, hiszen a szétszakadás, ill. a fúzió során a két fragment kölcsönhatásaként fellépő deformációk eltérő jellegűek. Tény azonban, hogy a Facchini által levezetett empirikus potenciált, illetve annak parabolaközelítését használva a tömegeloszlás és a kinetikus energia spektruma a kísérleti eredményekkel kvalitatíve jó egyezésben számolható.

### 2.3.3. *A hasadási folyamatban felszabaduló $Q$ teljes energia*

Modellünkben a rendelkezésre álló energiák ismerete alapvető fontosságú, hisz a statisztikus folyamatokat meghatározó állapotssűrűségek, továbbá a hasadást gátló potenciálgáton való áthaladás valószínűsége erősen energiafüggő. A felszabaduló energiákat a különféle félempirikus tömegformulák alapján számolhatjuk. Tekintettel arra, hogy a hasadási fragmentek különleges állapotú és többnyire erősen deformált magok, a különböző tömegformulák, amelyeket elsősorban a stabil magok adataihoz illesztnek, elég jelentős eltérésekre vezethetnek.

Myres és Swiatecki [My66] a magok potenciális energiáját az  $N$  neutron,  $Z$  protonszám és a magalak függvényében, a héjkorrekciókkal módosított cseppmodell alapján határozták meg. A héjkorrekciókat  $N$  és  $Z$  egyszerű függvényeiként vették fel úgy, hogy az a deformáció növekedésével egyre csökkenjen. Az így kapott hét-paraméteres formula minimumainak megkeresésére szolgáltatja az egyensúlyi deformáció és az alapállapotú magtömeg értékeket. A részletek érintése nélkül, a feltelezett alakfüggő tömegformula a következő:

$$M(N, Z, \text{alak}) = M_n \cdot N + M_H \cdot Z + E_{\text{térfogati}} + E_{\text{felületi}} + E_{Cb} + \text{párkorrekció} + \text{héjkorrekció}. \quad (31)$$

A magalakot a felületi és az elektrosztatikus energiában, a deformált és a deformálatlan gömbi mag felületének, ill. elektrosztatikus energiájának hányadosát leíró függvénnyel vették figyelembe. A héjmodellnek megfelelő korrekciós tényezőben expliciten adott függvényekkel vették figyelembe a magnívónak a héjszerkezetnek megfelelő „csomósodását” — az egyenletes nívósűrűségtől való eltérését. A különböző  $A_1Z_1$ – $A_2Z_2$  fragmentpárokra vezető hasadásnál felszabaduló energia  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadása esetén:

$$Q(A_1, Z_1, A_2, Z_2) = M(^{252}\text{Cf}) - M(A_1Z_1) - M(A_2Z_2). \quad (32)$$

### 2.3.4. *A magok nívósűrűsége*

Kísérletekből származó ismeretek szerint a magok nívósűrűsége a gerjesztési energia növekedésével rendkívül gyorsan növekszik. Jelentős különbségek figyelhetők meg a mágikus és nem mágikus magok nívósűrűségében, továbbá kimutatható a nukleonok párosságának hatása is. A nívósűrűség elméleti leírásától meg kell kívánnunk ezen alapvető tulajdonságok reprodukálását. Tekintsünk például egyfajta, független fermionokból álló rendszert, legyen az egyrészecske állapotok  $d$  távolsága



állandó. A lehetséges állapotok számának meghatározása kombinatorikai probléma: 0 gerjesztési energián 1 állapot,  $d$  energiánál 2 állapot,  $2d$  energiánál 4 állapot ... Az állapotok számának gyors növekedése az energiával a fermion állapotok energiájának additivitásából következik. Általában a rendszer viselkedését a szabadsági fokokkal, az additív energiájú „elemi gerjesztésekkel” írhatjuk le.

Tekintsük a

$$\int w(E) \exp\left(-\frac{E}{t}\right) dE = \exp\left(-\frac{F}{t}\right) \quad (33)$$

ismert kifejezést. A  $t(E)$  összefüggés meghatározásához előírjuk, hogy a rendszer átlag energiája az  $U$  gerjesztési energia legyen:

$$U = \frac{\int E w(E) \exp\left(-\frac{E}{t}\right) dE}{\int w(E) \exp\left(-\frac{E}{t}\right) dE}, \quad (34)$$

$t$ ,  $U$  és  $F$  a statisztikus mechanikában a  $kT$  hőmérsékletnek, a rendszer energiájának és a szabad energiának felel meg. (34) teljesülése esetén (33) integrandusának éles maximuma van  $U$  közelében, tehát

$$\exp\left(-\frac{F}{t}\right) = w(U) \lambda(U) \exp\left(-\frac{U}{t}\right), \quad (35)$$

ahol  $\lambda(U)$  energia dimenziójú mennyiség,  $w(U)$  az energiának lassan változó függvénye. Vezessük be az entrópiát  $S = (U - F)t^{-1}$  alakban, (33) és (34) alapján megkapjuk az entrópia termodinamikai definícióját:

$$\frac{dS}{dU} = \frac{1}{t}. \quad (36)$$

(35)-ből pedig a nívósűrűsége kapunk egy összefüggést:

$$w(U) = \lambda(U)^{-1} \exp(-S(U)). \quad (37)$$

(37)-et (35)-be behelyettesítve az ismeretlen  $\lambda(U)$  függvény kiszámítható:

$$\lambda(U) = \int dE \exp\left[-\frac{1}{2t^2} (E - U)^2 \frac{dt}{dE}\right] = t \left(2\pi \frac{dU}{dt}\right)^{1/2}. \quad (38)$$

$\lambda(U)$ -ra kapott eredményünket (37)-be behelyettesítve, az átlagos nívósűrűség:

$$w(U) = \left(2\pi \frac{dU}{dt}\right)^{-1/2} t^{-1} \exp(S(U)). \quad (39)$$

Ha további mozgásállandókat vezetünk be,  $F$  és így  $\lambda(U)$  is változik. Minden új mozgásállandó bevezetése  $t^{1/2}$  faktort hoz be  $\lambda(U)$ -ba [Be36].

$$w(U) \approx t^{-1-(m/2)} \left(\frac{dU}{dt}\right)^{-1/2} \exp(S(U)) \quad (40)$$

A nívósűrűség eloszlás (40) általános alakját a továbbiakban konkrét számolásokra alkalmas alakra hozzuk. Tételezzük fel, hogy a rendszerre jellemző  $U(t)$  függés

$$U = at^n \quad (41)$$

alakú. Nukleonokból álló Fermi gázra az ekvidisztans nívótávolság modellben  $n=2$  és  $a=\pi^2 g/6$ , ahol  $g^{-1}$  az egyrészecske állapotok távolsága a Fermi nívó közelében. Két új mozgásállandót vezetünk be a proton és neutron gáz nívósűrűségének leírására: legyen  $g_P$  és  $g_N$  a proton, ill. neutron egyrészecske nívók sűrűsége. A nívósűrűség valamennyi  $I$  és  $M$  kvantumszámú állapotra vonatkozóan:

$$w(U) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} a^{-1/4} U^{-5/4} \exp(2(aU)^{1/2}), \quad (42)$$

itt  $a = \frac{\pi^2}{6} (g_P + g_N)$ . A különböző  $M$  kvantumszámú állapotok eloszlása olyan  $|IM\rangle$  állapotokra, ahol  $I > M$  [Be37]:

$$\begin{aligned} \varrho(U, M) &= \text{konst } t^{-5/2} \left( \frac{dU}{dt} \right)^{-1/2} e^S \exp \left( -\frac{M^2}{2\sigma^2} \right) = \\ &= w(U) \frac{\exp(-M^2/2\sigma^2)}{\sigma \sqrt{2\pi}}, \end{aligned} \quad (43)$$

ahol a spinfüggő paraméter  $\sigma^2 = g \langle m^2 \rangle t$ ,  $\langle m^2 \rangle$  az egyrészecske állapotok mágneses kvantumszámainak négyzetes átlaga,  $\langle m^2 \rangle \sim \text{konst } A^{2/3}$ . Külső tér hiányában az  $|I+1, I+1\rangle$ ,  $|I+1, I\rangle$  típusú állapotok degeneráltak. Képezhető a különböző spinű állapotok eloszlása:

$$\varrho(U, I) = \frac{w(U)}{\sqrt{2\pi}\sigma} \left\{ \frac{(2I+1) \exp \left[ -\left( I + \frac{1}{2} \right)^2 / 2\sigma^2 \right]}{2\sigma^2} \right\}. \quad (44)$$

A spinekre összegezve a nívósűrűség eloszlása:

$$\varrho(U) = \sum \varrho(U, I) \simeq \frac{w(U)}{2\sqrt{2\pi}\sigma^3} \int_0^\infty dx \exp(-x/2\sigma^2) = \frac{w(U)}{\sqrt{2\pi}\sigma}. \quad (45)$$

A nívósűrűség alapján definiálható a maghőmérséklet

$$T^{-1} = \frac{d}{dU} \log \sigma = \sqrt{\frac{a}{U}} - \frac{5}{4U}. \quad (46)$$

(37)-ben  $\lambda(U) = \text{konstans}$  közelítésben  $T=t$ , egyébként

$$T^{-1} = t^{-1} - \frac{d}{dU} \log \lambda(U). \quad (47)$$

A paraméterek értéke a Fermi gáz modell alapján számolható, azonban a modell közelítő jellege miatt célszerűbb empirikusan meghatározni értéküket. A tapasztalat szerint az  $a$  nívósűrűség paraméter a sima tömegszámfüggésen túlmenően függ a

neutron és protonszám párosságától. A párkölcsönhatást úgy vehetjük figyelembe, hogy az alapállapotot egy  $\delta$  korrekcióval eltoljuk s attól mérjük a gerjesztési energiát:

$$\varrho(U') = \varrho(U + n\delta). \quad (48)$$

$n$  a végmag párosságától függően 0 ps-ps magra, 1 ptn magra, 2 ptn-ptn magra [Ca58]. Gilbert és Cameron formulája a nívósűrűség paraméter számítására [Gi65]:

$$a/A = 0,00917S + 0,142 \quad (\text{MeV}^{-1}) \quad (49)$$

gömb alakú magokra, deformált magokra pedig:

$$a/A = 0,000917S + 0,120 \quad (\text{MeV}^{-1}), \quad (50)$$

ahol  $S = S(Z) + S(N)$  táblázatosan megadott héjkorrekciók.

A kétszeresen zárt héjak közelében további eltérések mutatkoznak. *Newton* [Ne56] az állandó  $g^{-1}$  egyrészecske nívótávolságot a héjmodell egyrészecske állapotainak távolságával helyettesítette:

$$a = \frac{\pi^2}{6} g = \frac{\pi^2}{6} \cdot 2\alpha A^{2/3} (\bar{J}_N + \bar{J}_P + 1), \quad (51)$$

ahol  $\bar{J}_N$  és  $\bar{J}_P$  a neutron és proton héjmodell állapotok spinjének átlagértéke.

### 2.3.5. A neutronok energiaeloszlása a tömegközépponti rendszerben

Az erősen gerjesztett fragmentből, mint compound magból adott  $\varepsilon$  energiájú neutronok kilépésének valószínűségét a következő összefüggéssel írhatjuk le [BI53]:

$$\Phi(\varepsilon) d\varepsilon = \text{const } \varepsilon \cdot \sigma_c(\varepsilon) \varrho(U_r) d\varepsilon, \quad (52)$$

ahol  $\sigma_c(\varepsilon)$  az inverz folyamat hatáskeresztmetszete,  
 $\varrho(U_r)$  a maradékmag nívósűrűsége.

(52) formula tartalmazza a statisztikus bomlás fő tulajdonságait. A bomlás független a compound mag létrejöttének módjától. A folyamat dinamikáját az inverz hatáskeresztmetszet tartalmazza. Kísérletileg a nívósűrűségre az emittált részecskék energiaeloszlásából következtethetünk, azonban a nívósűrűség az ismeretlen inverz hatáskeresztmetszettel együtt jelenik meg (52)-ben. A gerjesztett magra vezető reakció hatáskeresztmetszete, az inverz hatáskeresztmetszet nem határozható meg kísérletileg. A párolgási közelítés lényege, hogy a magot klasszikus fekete testnek tekintik, mely minden a felületére eső részecskét abszorbeál. Neutronokra, Coulomb gát hiányában a határkeresztmetszet a  $\pi R^2$  geometriai hatáskeresztmetszettel egyezik meg.

Használjuk fel (37)-ből az entrópia és a nívósűrűség kapcsolatát:

$$S = \log \varrho(U). \quad (53)$$

Az  $S(E)$  entrópiát fejtsük Taylor sorba  $U = U_r^{\max}$ , a maximális gerjesztési energia környezetében:

$$S(U_r^{\max} - \varepsilon) = S(U_r^{\max}) - \varepsilon \left( \frac{dS}{dU} \right)_{U_r^{\max}} + \dots \quad (54)$$



A sorfejtéssel közelíthetjük a nívósűrűséget (53) alapján. A neutronok energia-eloszlására (55) adódik:

$$\Phi(\varepsilon) d\varepsilon = \text{const } \varepsilon \cdot \sigma_c(\varepsilon) \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T(U_r^{\max})}\right) d\varepsilon. \quad (55)$$

A párolgási közelítést kihasználva neutronok esetében  $\sigma_c(\varepsilon)$ , konstanssal közelíthető; így (55)-ből a jól ismert párolgási formulához jutunk:

$$\Phi(\varepsilon) \sim \varepsilon \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right). \quad (56)$$

A párolgási formula levezetése során kihasználtuk, hogy  $\varepsilon$  kicsi a maximális maradék gerjesztési energiájához képest.  $E_r^{\max}$  a részecskekilépés után maximális gerjesztési energia:

$$U_r^{\max} = U_i - E_b,$$

ahol  $U_i$  a kezdeti gerjesztési energia,  $E_b$  a neutron kötési energiája. A párolgási formulában a neutron energiaeloszlást meghatározó maghőmérséklet a részecskekilépés után visszamaradt mag maghőmérséklete, Weisskopf eredeti levezetésében a maradék mag maximális gerjesztési energiájához tartozó maghőmérséklet:

$$T = \left(\frac{U_r^{\max}}{a}\right)^{1/2}.$$

B) Terrell [Te59] egy átlagos maghőmérsékletet vezetett be, amely az átlagos maradék gerjesztési energiához tartozik:

$$T(\bar{U}_r) = T(U_i - E_b - \bar{\varepsilon}), \quad (57)$$

ez esetben nem szükséges  $\varepsilon \ll U_r^{\max}$  feltételezése, viszont kihasználjuk, hogy  $|\bar{\varepsilon} - \varepsilon| \ll \bar{U}_r$ . (Az (54)  $\varepsilon$  szerinti sorfejtés nem  $U_r^{\max}$  hanem  $U_r^{\max} - \bar{\varepsilon}$  körül történik, ez az előzőnél realisabb közelítés.)  $\sigma_c = \text{konstans}$  feltételezéssel a párolgási spektrumot kapjuk, ahol

$$T = \left(\frac{\bar{U}_r}{a}\right)^{1/2}.$$

C) Az eddigiekben a több neutron kilépésű kaszkád folyamatot egyetlen, átlagos maghőmérséklet értékkel írtuk le. Nyilvánvaló, hogy  $T$  értéke minden neutron kilépés után jelentősen csökken, az első neutron kilépése utáni  $T_1$  értéktől 0-ig. Le Couteur [Le52] mutatta meg, hogy több lépésű kaszkádban párolgó neutronok energiaspektruma a következő formulával írható le:

$$\Phi(\varepsilon) \approx \sigma_c \cdot \varepsilon^{l-1} T_*^{-l} \exp(-\varepsilon/T_*), \quad (58)$$

ahol

$$l \approx \frac{16}{11} \quad \text{és} \quad T_* = \frac{11}{12} T_i$$

és  $T_i$  a kezdeti maghőmérséklet.

A levezetés során kihasználtuk, hogy  $T \ll E_b$ . A Le Couteur által megadott formula lényegében a Maxwell eloszlással egyezik meg, ahol  $l = \frac{3}{2}$  és  $T_* = T_i$ . A folyamat pontosabb leírására, a  $T_i$  kezdeti maghőmérséklet meghatározására Lang és Le Couteur [La64] egy új összefüggést adott meg. Az utolsó neutron kilépése után a maradék mag gerjesztési energiája 0 és  $E_b$  (kötési energia) közé esik, feltételezve, hogy mindig neutron lép ki, ha az energetikailag lehetséges. Tehát az átlagos emittált energia  $\bar{\varepsilon} = U_i - \frac{1}{2} E_b$ . Meghatározható  $U_i$  kezdeti gerjesztési energiájú magból emittált neutronok száma:

$$N(U_i) = \int_0^{U_i - \frac{1}{2} E_b} \frac{dU}{E_b + \bar{\varepsilon}}. \quad (59)$$

1 neutron kilépésére párolgási spektrumot feltételezve a kaszkádban kilépő összes neutron energia eloszlása:

$$\Phi(\varepsilon, U_i) \approx \frac{N(U_i) \varepsilon^{l-1} \exp(-\varepsilon/T_*)}{\Gamma(l) T_*^l}. \quad (60)$$

$$l = \frac{16}{11}, \quad T_* = \frac{11}{12} T_i, \quad \text{ahol} \quad T_i = T \left( U_i - \frac{1}{2} E_b \right).$$

$\Gamma(l)$  az eloszlást egységre normáló gamma függvény.

Összefoglalva a maghőmérséklet és a spektrumalak származtatására ismertetett számításokat, megállapíthatjuk, hogy a magasan gerjesztett fragmentekből kilépő neutronok energiaeloszlását az (56) párolgási spektrum írja le, ha a kilépő neutronok száma kevés ( $\sim 1$ ), míg egy több lépéses kaszkád folyamatban kilépő neutronokra az egyedi, más-más maghőmérséklettel jellemzett párolgási spektrumok összege (a (61) egyenlet, Lang-Le Couteur eloszlás) Maxwell eloszlással közelíthető. Az ismertetett módon végrehajtott számítások és a mérési eredmények (neutron energia és szögeloszlás) összevetése is igazolja ezt a képet [K171].

A laboratóriumi rendszerben mért energia eloszlás általában jól leírható egy Maxwell eloszlással, függetlenül attól, hogy a TKR-ben milyen energiaeloszlást tételeztünk fel az egyes fragmentekből kilépő neutronokra (párolgási, Maxwell, Lang-Le Couteur kaszkád, Bowman) [K171].

Az elméleti áttekintésben csak a repülő fragmentekből kilépő, a TKR-ben izotrop eloszlású neutronok leírásával foglalkoztunk, nem tértünk ki az ún. „scissio”-es neutronok problémájára, mely hosszú időn át vitatott kérdés volt az irodalomban. Feltételezés szerint a scissios neutronokat a laboratóriumi rendszerben stacionárius rendszer emittálja izotrop eloszlással, tehát a fragmentek szétszakadása előtt, a szétszakadás pillanatában lépnek ki. Bohr és Wheeler vetette fel 1939-ben a nyakból történő neutron emisszió lehetőségét, majd az utóbbi években néhány mérés kiértékelése kapcsán ismét előtérbe került. A legújabb számítások szerint azonban a kísérleti eredmények jól értelmezhetők a scissios neutronok feltételezése nélkül is, legalábbis a kis gerjesztési energiájú (spontán, termikus) hasadás esetében. A részleteket illetően Kluge munkáira utalunk [K171].



Az eddigiekben az általánosság erős korlátozásával, egyszerűsítő feltevések kihasználásával áttekintettük, hogyan számítható a hasadási neutronok energia eloszlása tisztán elméleti úton. Gyakorlati számításoknál, a hasadási neutron spektrum mérések kiértékelésénél célszerű a számításokhoz szükséges mennyiségek egy részét kísérleti adatokból venni, így kevesebb bizonytalan kiindulási adat felhasználásával várhatjuk, hogy tisztázni tudjuk a neutronok energiaeloszlását a tömegközépponti, illetve a laboratóriumi rendszerben.

### 3. A $^{252}\text{Cf}$ HASADÁSI NEUTRON ENERGIASPEKTRUM MÉRÉSEK ÁTTEKINTÉSE

A második fejezetben megmutattuk, hogy a különböző magoknál mért hasadási neutron energiaspektrumokat kezdetben a Watt-kifejezéssel, később a Maxwell eloszlással írták le. A mérések döntő többsége igazolta azt a feltevést, hogy a hasadási neutronok energiaspektruma a laboratóriumi rendszerben jól közelíthető Maxwell eloszlással, azonban a különböző módszerekkel mért neutronspektrumoknál számított  $T$  energiaparaméter értékek nagy szórást mutatnak.

Mind elméleti, mind gyakorlati szempontból fontos az eltérő kísérleti eredmények vizsgálata, az eltérések okainak tisztázása. A  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadó jellege miatt a mérések az elérhető legtisztább feltételek között hajthatók végre, a reaktorok és gyorsítók mellett fellépő nagy háttér nélkül. A reaktorfizikai szempontból jelentős hasadó magokra vonatkozó mérések egyik része a  $^{252}\text{Cf}$ -ra vonatkoztatott relatív mérés, ezért a reaktorfizikusok szempontjából rendkívül fontos, hogy a  $^{252}\text{Cf}$ -ra vonatkozó adatok egyértelműek és pontosak legyenek. A kísérleti adatok analízisével rámutatunk a  $T$  paraméter értékeiben jelentkező eltérések néhány okára.

Néhány szerző a hasadási neutron spektrumnak a Maxwell eloszlástól való eltérésére mutatott rá. Ilyen eltérés csúcsok jelentkezése a neutron energia spektrumban [Ne69, Za70], a neutroneloszlás eltérése a Maxwell eloszlástól a kisenergiájú tartományban [Me67]. A neutron energiaspektrumban jelentkező csúcsokról megmutatjuk, hogy a szerzők álláspontjától eltérően magyarázhatók a kísérleti elrendezésből. A 4. fejezetben ismertetésre kerülő mérésünkkel ellenőrizzük a neutron spektrum alakját a kisenergiájú tartományban.

#### 3.1. A Maxwell eloszlás $T$ paraméterének meghatározása

Az 1. táblázatban, illetve a 8. ábrán foglaltuk össze a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutron spektrumára vonatkozó méréseket.

Mint az adatokból látható, a mérésekből számított  $T$  értékek nagy szórást mutatnak. Meadows [Me67] mutatott rá az eltérések egy lehetséges okára. A neutron detektor hatásfokának mérésénél más-más reakciókat használtak neutronok előállítására, a hatásfok mérések egy része az  $(n, p)$  szórás hatáskeresztmetszetét használja fel, más mérések különböző töltött részecske reakció hatáskeresztmetszeteket. ( $^7\text{Li}(p, n)^7\text{Be}$ ,  $^3\text{H}(p, n)^3\text{He}$ ,  $^2\text{H}(d, n)^3\text{He}$ ). E feltevés jogossága számszerűen nem ellenőrizhető. Megmutatjuk, hogy néhány, a szerzők által nem ismert vagy elhanyagolt effektus figyelembevételével értelmezhető a  $T$  energiaparaméter értékeiben jelentkező nagy szórás.

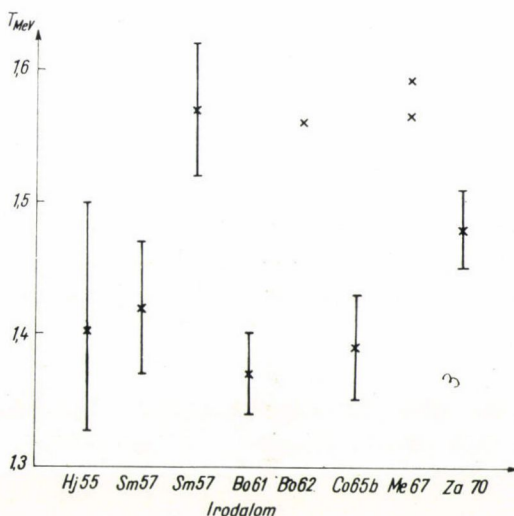


## 1. TÁBLÁZAT

Szerző	Mérési módszer	$T$ (MeV)	Irod.
E. Hjalmar et al.	fotoemulzió	$1,402 \pm 0,098$ $-0,085$	Hj55
A. B. Smith et al.	fotoemulzió	$1,57 \pm 0,05$	Sm57
	repülési idő	$1,42 \pm 0,05$	Sm57
T. W. Bonner	Bramblett-számláló	$1,367 \pm 0,030$	Bo61
H. R. Bowman et al.	repülési idő	1,56	Bo62
H. Condé et al.	repülési idő	$1,39 \pm 0,04$	Co65b
J. W. Meadows	repülési idő	1,592, 1,565	Me67
Y. S. Zamyatin et al.	repülési idő	$1,48 \pm 0,03$	Za70
H. Werle	proporc. számláló	$1,40 \pm 0,07$	We70

## 3.1.1. Mérések repülési idő módszerrel

A  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutron spektrumára vonatkozó mérések legnagyobb részét repülési idő technikával végezték, a 4. fejezetben részletes ismertetésre kerülő, általunk elvégzett mérés is repülési idő módszeren alapul. Ezért az egyes mérések diszkussziója előtt áttekintjük a repülési idő módszerrel végzett méréseknél fellépő problémákat általában. Megvizsgáljuk a különböző eredetű hátterek hatását, ezek jelentkezését a különböző mérésekben. Egyszerűsítő feltevésekkel számításokat végzünk a késő-gamma sugárzás okozta háttér nagyságának meghatározására, megvizsgáljuk, hogy mennyiben befolyásolja a  $T$  paraméter értékét a késő-gamma sugárzás okozta háttér elhanyagolása.



8. ábra

## 3.1.1.1 Háttérproblémák repülési idő módszeren alapuló mérésekben

A neutronok energiájának mérése egy adott távolságon való repülésük idejének mérésén alapul

$$E = \left( \frac{72,3 \cdot L}{t} \right)^2, \quad (61)$$

ahol  $E$  energia MeV-ben  
 $L$  repülési távolság m-ben  
 $t$  repülési idő nsec-ban.

A „0” időpontot, a hasadás pillanatát, a hasadási detektorban a hasadási termék által keltett jel jelöli ki, a neutron-detektorban a detektált neutron által keltett jel jelöli ki az energiával arányos időtartam végét. Az időtartam mérése start-stop rendszerű idő-amplitúdó konverterrel történik, ennek jeleit dolgozza fel a sokcsatornás analizátor. A gyakorlati megvalósításban a neutron detektor adja a startjelet és a hasadási detektor konstans idővel késleltetett jele a stop jelet, mivel a neutron detektor terhelése lényegesen kisebb a hasadási detektorénál. Az időmérő gyors koincidenca mellett egy lassú koincidenca rendszer gondoskodik a megfelelő jelek kiválasztásáról. A hasadási detektor jeleinek amplitúdóspektrumából egy integrál-diszkriminátor választja szét a hasadási jeleket az  $\alpha$ -részecskék keltette impulzusoktól és az elektronikus zajtól. Ugyanígy a neutron detektor jeleinek amplitúdó spektrumát is diszkriminátor analizálja, integrál- vagy differenciál-diszkriminátor az alkalmazott szcintillátortól függően. A diszkriminátorok jeleinek koincidenzája kapuzza az analizátort.

A háttér problémák általános áttekintéséhez nem szükséges a mérőrendszer konkrét adatainak ismerete, a következő általános feltevéseket használjuk:

1. A hasadási detektor csak a hasadási termékeket detektálja és hasadási termékeket  $2\pi$  térszögben 100% hatásfokkal detektálja. A hasadási detektor adja az idő-amplitúdó konverter stop jelét.

2. A neutron detektor neutronokra és gamma-sugarakra egyaránt érzékeny. A neutron detektor szolgáltatja az idő-amplitúdó konverter start jelét.

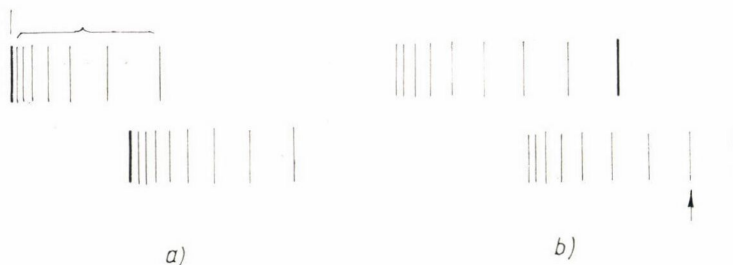
### Véletlen háttér

Az idő-amplitúdó konverter jeleit analizáló sokcsatornás analizátor minden csatornája koincidenca egységként fogható fel, a felbontási idő a csatorna szélességgel egyenlő. A véletlen koincidenciák száma egyszerűen mérhető, ha a spektrum egy részén a szisztematikus eseményeket alkalmas késleltetéssel kizárjuk. A hasadás pillanata előtti időtartamhoz tartozó koincidenciák a véletlen koincidenciák. A véletlen koincidenciák által okozott háttér egyenletes eloszlású.

A minden koincidenca mérésben fellépő véletlen koincidenciák okozta háttér mellett a hasadási neutron spektrum mérésnél (és általában a többrészecske kilépéses reakciók mérésénél) fellép egy speciális spektrum torzító effektus, a „szisztematikus-véletlen” háttér. A véletlen koincidenciák számát általában a következő formula adja meg:

$$N = 2\tau \cdot N_1 \cdot N_2, \quad (62)$$

ahol  $\tau$  a koincidenca egység felbontási ideje (a sokcsatornás analizátor csatorna-szélessége),  $N_1$  és  $N_2$  a beütésszámok a két bemeneti ágba ( $N_1 = N_n$  és  $N_2 = N_h$  a neutron, ill. a hasadási detektor beütésszámai időegység alatt). Esetünkben  $N_n$





csatornáról csatornára változik. Tekintsük a hasadás pillanata utáni eseményeket egy idődiagramon. A a) ábrán láthatók az események a tényleges időskála szerint, a b) ábrán pedig úgy, ahogy az idő-amplitúdó konverter észleli a jeleket.

Tegyük fel, hogy a b) ábrán nyíllal jelölt részecskét detektáljuk és a konverter az analizátor  $i$ . csatornájába ad egy jelet.  $N_n$  egyenlő a korábban történt események számával, vagyis az aktuális jelnél nagyobb konverter jelek számával. Ezért a véletlen koincidenenciák száma az  $i$ . csatornában:

$$N^i = \tau \cdot N_h \cdot \sum_{j=i+1}^{\infty} N_n^j, \quad (63)$$

ahol  $\tau$  a csatornaszélesség időegységben,  $N_h$  a hasadási detektor időegységre eső beütésszáma,  $N_n^i$  az események száma az  $i$ . csatornában. A 2-s faktor eltűnik, mert az események nem történhetnek fordított sorrendben.

Szemléletesebben úgy fogalmazhatjuk meg a szisztematikus-véletlen háttér fellépésének okát, hogy amennyiben az egyes hasadások között eltelt átlag időtartam kisebb, mint a konverter mérési idő tartományának és holtidejének összege, nagyobb valószínűséggel detektáljuk a hasadás után hosszabb idővel érkező részecskéket, mint a korábbiakat. Szisztematikusnak nevezzük az eseményt, mert ugyanazon hasadási aktushoz tartozó hasadási és neutron jelet észleltük, ugyanakkor véletlen is, mivel nem a neutron események tényleges valószínűség eloszlásának megfelelő eloszlást mértük, spektrum torzítás lép fel.

A szisztematikus-véletlen háttér alakja függ a mért spektrum alakjától (a neutron detektor hatásfokának energia függéséből, a relatív neutron és gamma-sugár detektálási hatásfoktól). Általában a háttér eloszlása közel egyenletes, csökken növekvő csatornaszámmal (növekvő energiával). A mért véletlen háttér nem tartalmazza a szisztematikus-véletlen háttérrel. A mérések kiértékelésekor számítással kell meghatározni a spektrumból. Kis energiáknál jelentős járulékot adhat a szisztematikus-véletlen háttér, mivel a kis energiájú neutronok előfordulási valószínűsége kicsi. Elhanyagolása megnöveli a kis energiákon mért beütésszámot, így a valóságosnál kisebb  $T$  értékeket kapunk a mérés kiértékelésekor.

### Szórt háttér

A hasadási neutron spektrum mérésekben fellépő, szóródott neutronok detektálása által okozott háttér nagysága a kísérleti körülményektől függ. A detektorokat körülvevő anyagokon szóródott neutronok egyrészt a hosszabb repülési út, másrészt a szóródásnál fellépő energiavesztés miatt hosszabb idő után érik el a neutron detektort, mint az ugyanilyen energiájú, közvetlen a neutron detektor felé repülő neutronok. A feltételezett mérőrendszerben a hosszabb repülési idő kisebb neutron energiának felel meg, tehát a szórt neutronok detektálása csökkenti a neutronok átlagenergiáját, vagyis a Maxwell eloszlás  $T$  energiaparaméterének értékét.

A szórt neutronok által okozott háttérrel mérésről kell meghatározni, megfelelő abszorbens anyagból készített árnyékoló kúpot helyezve a detektorok közé, elérhető, hogy a neutron detektor csak a környezeti anyagokon szóródott neutronokat detektálja. Az árnyékoló kúp méreteit úgy kell megválasztani, hogy elnyelje a megfelelő energiatartományban az összes, a forrásból közvetlen a neutron detektor felé repülő neutront, ugyanakkor ne abszorbeálja a szóródott neutronokat. Lényeges szempont az árnyékoló kúp anyagának kiválasztásánál, hogy az anyag neutronokra



vonatkozó totális hatáskeresztmetszete az energia sima függvénye legyen (pl. réz, sárgaréz stb.), amennyiben a totális hatáskeresztmetszet nem sima függvénye az energiának (pl. vas), jelentős spektrumtorzulások, csúcsok léphetnek fel (lásd. 3.2.2 fejezet). Az árnyékoló kúp készíthető nagy hidrogéntartalmú anyagból is, feltételezve, hogy a két- vagy többszörösen szóródott neutronok csak elhanyagolható valószínűséggel detektálódnak.

### *Késő-gamma sugárzás*

A hasadásnál fellépő késő-gamma sugárzás létezését először Johansson mutatta ki 1965-ben [Jo65]. Mérései szerint a  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál az összes gamma-sugárzás 6%-a a késő-gamma sugárzás,  $\tau_{1/2} \sim 15\text{--}100$  nsec félélettartammal.

Meadows [Me67] megmutatta, hogy hasadási neutron spektrum mérésben kis energiájú neutronok detektálásánál (hosszú idők mérésénél) a késő-gamma sugárzás detektálása jelentősen torzíja a spektrumot. A késő-gamma sugarak időeloszlása méréssel meghatározható. Li-üveg neutron detektort használva nagyon rövid (3—5 cm) repülési távolság esetben  $t > 30$  nsec időtartományban gyakorlatilag kizárólag késő-gamma sugarakat detektálunk. Plasztik foszfor neutron detektorokat alkalmazva a késő-gamma sugarak időeloszlása a hasadás pillanatához még közelebbi időintervallumokra is meghatározható, a detektorok küszöb-érzékenységétől függően.

Természetesen az 1965-nél korábbi hasadási neutron spektrum mérések kiértékelése a késő-gamma sugarak okozta háttér figyelembevétele nélkül történt. Ezért célszerűnek látszik a korábbi mérések paramétereinek ismeretében megbecsülni a késő-gamma sugarak detektálása által okozott háttérrel.

John és munkatársai [Jo70] rendkívül gondos, alapos méréssel részletes információkat adtak a  $^{252}\text{Cf}$  hasadásánál keletkező késő-gamma sugárzás tulajdonságairól. Megmérték az egyes gamma vonalak energiáját 0,1 keV pontossággal, a sugárzás félélettartamát, az egyes vonalak intenzitását, valamint minden vonalhoz meghatározták a kibocsátó fragment tömegszámát. 3—2000 nsec időintervallumban 144 vonalat bontottak fel. A 3.1.1.2 és 3.1.1.3 fejezetekben ismertetendő számításainkban John adatait használtuk fel. Meg kell jegyezni, hogy az egyes vonalakra vonatkozó adatok felhasználásával számított késő-gamma időeloszlások alsó becslést adnak, mivel a 0,2—2 MeV energia- és 5—100 nsec időintervallumokban a teljes késő-gamma sugárzás kb. 80%-át bontották fel diszkrét vonalakra.

#### *3.1.1.2. Neutron és késő-gamma sugárzás eloszlások számítása*

Néhány realisztikus közelítés felhasználásával megkíséreljük számszerűen meghatározni a késő-gamma sugarak detektálása által előidézett spektrum torzulást. Meghatározzuk a detektor hatásfokát neutron, ill. gamma-sugár detektálására, továbbá a hasadási neutronok és a késő-gamma sugarak energia, ill. időeloszlását így összevethetjük a detektált neutronok és késő-gamma sugarak számát.

Két szcintillátor típus szolgált neutron detektorként a különböző mérésekben: szerves plasztikok és  $^6\text{Li}$  tartalmú üveg szcintillátorok. Plasztik foszforokra vonatkozóan kevés adat van kis energiájú neutronok és gamma sugarak detektálásáról. Ezért számításainkban plasztik detektorok helyett antracén detektorokkal számoltunk. A plasztikok és az antracén összetétele, tulajdonságai hasonlóak (C és H aránya,

sűrűség stb.). Az antracén kristály abszolút fényhozama nagyobb, de *Birks* megmutatta [Bi54], hogy az antracén kristály és a szerves plasztikok relatív fényhozama különböző töltött részecskékre azonos. Két különböző típusú plasztik forszorra (Pilot B és NE-102) a relatív fényhozam azonosságát [Ho67] mutatta ki.

[Ho67] mérésekkel igazolta, hogy a szerves foszforok hatásfoka 0,2–5 MeV energiájú neutronok detektálása esetén jól leírható a következő összefüggéssel:

$$\varepsilon_n(E) = (1 - \exp(-\mu_H \cdot l)) \cdot \frac{E - E_{\text{küszöb}}^n}{E}, \quad (64)$$

ahol  $\mu_H$  az  $(n, p)$  szórás makroszkopikus hatáskeresztmetszete,  $l$  a szcintillátor vastagsága,  $E$  neutronenergia,  $E_{\text{küszöb}}^n$  a neutrontetektor érzékenységi küszöbe. A  $\mu_H$  makroszkopikus hatáskeresztmetszetet [Ho59]  $(n, p)$  szórási hatáskeresztmetszet adatainak felhasználásával számítottuk ki antracénre.  $E_{\text{küszöb}}^n$  értékét minden mérésre külön meghatároztuk, majd a szcintillátor vastagságát figyelembe véve kiszámítottuk a hatásfokot.

A gamma-sugár detektálásának hatásfokát az antracénre vonatkozó gamma-sugár abszorpció koeficiens adatakból számítottuk [Ne65]. Mivel a vizsgált gamma-sugár energia-tartományban a gamma-sugárzás csak Compton kölcsönhatásban lehet a szcintillátor anyaggal, a detektor érzékenységi küszöbét a neutron detektorhoz hasonló módon

$$\varepsilon_\gamma(E) = \varepsilon_0(E) \cdot \frac{E - E_{\text{küszöb}}^\gamma}{E} \quad (65)$$

alaku kifejezéssel vettük figyelembe.  $E_{\text{küszöb}}^\gamma$  értékét minden mérés esetében külön meghatároztuk.

Li-üveg detektorok részletes ismertetésére a 4. fejezetben tértünk ki. Számításainkban a [Me67]-ben közölt abszolút neutron detektálási hatásfok görbét használtuk fel. A detektor küszöbérzékenysége 1 MeV gamma energiának felel meg. [Me67]  $^{60}\text{Co}$  gamma-sugárzás detektálásánál 1% hatásfokot mért. Méréssel meghatároztuk az üveg detektor gamma hatásfokát  $^{60}\text{Co}$  és  $^{22}\text{Na}$  gamma-sugárzásnak vizsgálatával, eredményül 1,2% adódott. Mivel a késő-gamma sugárzásban 1 MeV felett csak 1,2–1,3 MeV energiájú gamma-sugárzás lép fel [Jo70], számolásainkban a fenti hatásfokmérések adatait használtuk fel.

A neutronok energiaeioszlását Maxwell eloszlást feltételezve számítottuk,  $T = 1,5$  MeV energiaparaméterrel. Az eloszlást úgy normáltuk, hogy  $\bar{\nu} = 3,77$  neutront adjon hasadásonként. A hatásfok figyelembevétele után a mérésben használt  $L$  repülési távolság hosszának ismeretében végrehajtottuk az  $N(E)dE \rightarrow N(t)dt$  transzformációt, így megkaptuk a hasadásonként detektált neutronok számának időeloszlását.

90 gamma vonal adataiból [Jo70] számítottuk a késő-gamma sugárzás időeloszlását. Minden gamma vonalra az exponenciális eloszlást úgy normáltuk, hogy végtelen időre összegezve a mért intenzitás adódjon. Az egyes gamma vonalakra a vonalak energiájának és a hatásfoknak ismeretében kiszámoltuk az időeloszlást, az egyes vonalak járulékát összegezve megkaptuk a késő-gamma sugárzás időeloszlását.

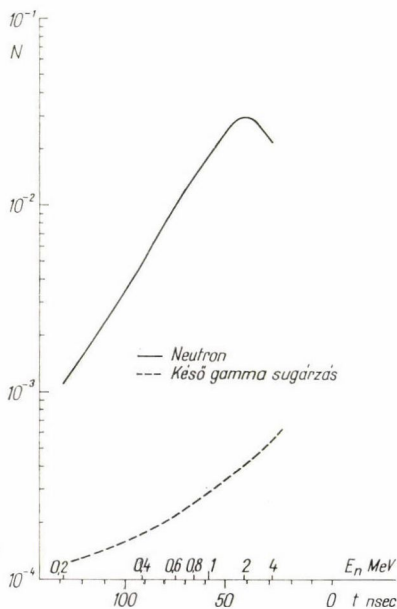
A neutronok és a késő-gamma sugárzás eloszlását összevetve következtetünk a késő-gamma sugárzás detektálásából eredő háttér spektrumtorzító hatására.



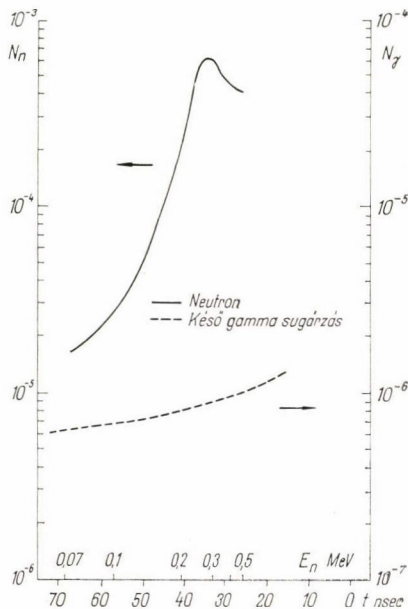
### 3.1.1.3. A mérések diszkussziója

A) *Smith, Fields és Roberts* [Sm57] 0,2–3 MeV energiatartományban mérték a neutron spektrumot  $L=80$  cm repülési távolságnál. A hasadási termékeket gáz-szcintillációs számlálóval detektálták, a neutron detektor  $\varnothing 4,88 \times 3,88$  cm-es Pilot B plastík szcintillátor volt. A rendszer időfelbontása 2–3 nsec. Hidrogén tartalmú árnyékoló kúpot helyezve a detektorok közé mérték a szórt háttérrel. A  $T$  energia-paraméter értéke *Condé* [Co65b] kiértékelése szerint  $T=1,42 \pm 0,05$  MeV.

Szerzők nem közlik a neutron detektor küszöb érzékenységét. Különböző küszöb érzékenységeket feltételezve a 3.1.1.2.-ben leírt módon számítottuk a „mért” neutron spektrumot, ezt összevetve a szerzők által közölt mért spektrummal, neutronregiában számolva 100 keV küszöb energia adódott. Az antracénre vonatkozó fényhozam-részecskeenergia összefüggések ismeretében meghatároztuk a 100 keV neutron energiával fényhozamban ekvivalens elektron energiát: 5 keV, protonokra [Fr51] és elektronokra [Sc60] méréseit használtuk fel. [Sc60] megmutatta, hogy az 5 keV energiájú gamma sugarak teljes energiájukat leadják a kristályban tehát az 5 keV elektronenergia fényhozamban 5 keV gamma energiával egyenlő. Számításainkat 100 keV neutronenergiának, ill. 5 keV gamma energiának megfelelő érzékenységi küszöbvel végeztük. Az 1 hasadásra eső,  $4\pi$  térszögben detektált események eloszlása a 9. ábrán látható. A két görbe összevetéséből látható, hogy a késő-gamma sugarak detektálása jelentős spektrum torzulást okoz. A gamma sugarak által okozott beütésszám növekedés 0,2 MeV-nél 10%, 0,5 MeV-nél 3,6%, 2 MeV-nél 1%. Kis energiáknál jelentősen növeli a beütésszámot, ugyanakkor nagyobb energiáknál elhanyagolható, így a valóságosnál kisebb  $T$  értéket eredményez. A neutronokra  $T=1,5$  MeV feltételezésével számított eloszláshoz hozzáadva a késő-gamma suga-



9. ábra



10. ábra



rák járulékát, meghatároztuk  $T$  értékét:  $T=1,4$  MeV. Természetesen a számítások közelítő volta miatt  $T$  tényleges értékére így nem következtethetünk.

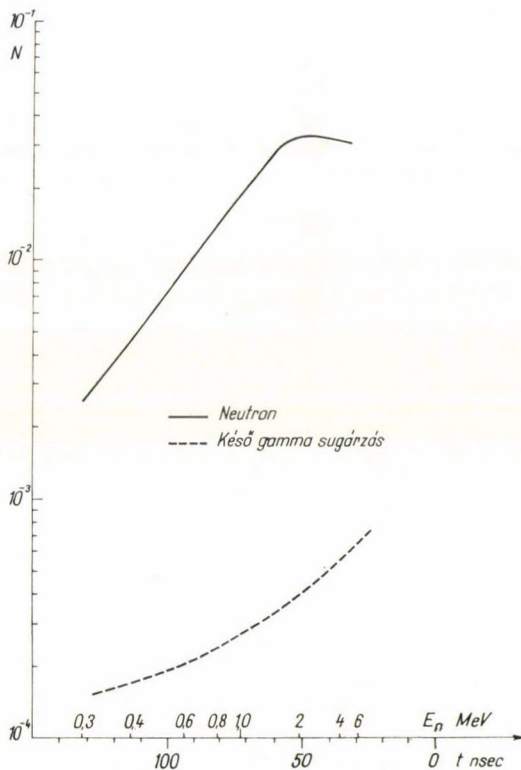
Szerzők nem vették figyelembe a szimmetrikus-véletlen háttérrel, melyről megmutattuk, hogy elhanyagolása szintén  $T$  értékének csökkenését eredményezi.

Megállapíthatjuk, hogy a késő-gamma sugárzás és a szisztematikus-véletlen koincidenenciák okozta hátterek figyelembe nem vétele nagyságrendben 100 keV-el csökkentette a  $T$  energiaparaméter értékét.

B) Bowman, Thompson, Milton és Swiatecki [Bo62] megmérték a  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező neutronok sebesség (energia) és szögeloszlását. Az energia mérés repülési idő módszerrel történt, 100 cm repülési távolságnál, plasztik neutron és hasadási detektorok felhasználásával. Az energiaeloszlást  $11^\circ$ -os lépésekben mérték különböző szögeknél, a szögekre integrálva meghatározták a totális neutron energiaspektrumot, a neutronok átlagenergiája  $2,34 \pm 0,05$  MeV ebből Maxwell eloszlást feltételezve  $T=1,56$  MeV adódik. Megmérték a szórt háttérrel, meghatározták a szisztematikus-véletlen háttérrel, de az adatok kiértékelésénél nem vették figyelembe az így kapott háttér komponenseket, hanem a mért spektrum különböző részein meghatározták a háttérrel: a véletlen koincidenencia tartományban, a gamma és neutron csúcs közötti völgyben és 450 keV neutronenergia alatti tartományban, ahol a neutron detektálási hatások 0. Ezen három háttér értékből határozták meg a háttér eloszlását a teljes spektrumra, így módon a késő-gamma sugarak létezésének ismerete nélkül sikerült a reális háttérrel figyelembe venni.

C) Condé és During [Co65b].

A mért neutron energiaspektrumhoz Maxwell eloszlást illesztettek, az eloszlás energiaparamétere  $T=1,39 \pm 0,04$  MeV. A méréseket két különböző típusú neutron detektorral végezték. A hasadási detektor mindkét esetben xenon töltésű gázszcintillációs számláló volt. 0,07 és 0,5 MeV között  $\varnothing 4,42 \times 0,95$  cm-es Li üveg szcintillátorral detektálták a neutronokat, 25 cm repülési távolságnál. A számított eloszlások a 10. ábrán láthatók. 0,3 és 7 MeV között, 100 cm repülési távolságnál  $\varnothing 12,6 \times 5,04$  cm-es Ne-102 plasztik szcintillátor szolgált neutron detektorként [Co65a]. A detektor érzékenységi küszöbe 5 keV gamma energiának felelt meg [Co65b]. Mint korábban megmutattuk, az 5 keV gamma energia 100 keV neutron energiával ekvivalens fényhözamban. A számított eloszlások a



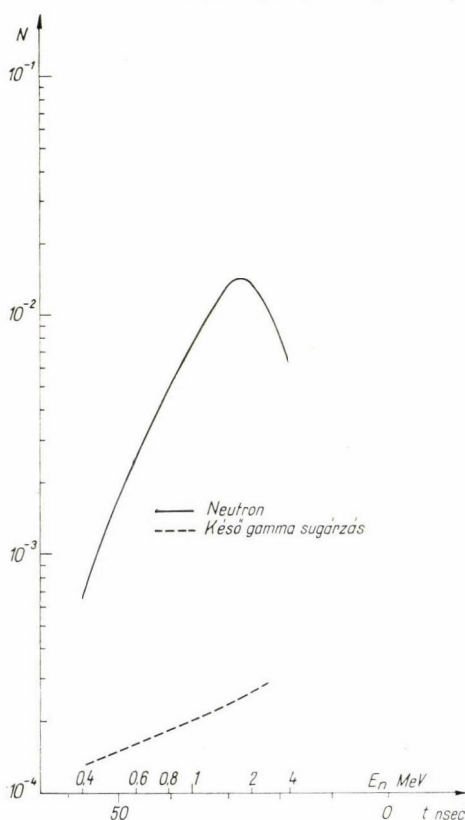
11. ábra

11. ábrán láthatók. Az üveg szcintillátor esetében a késő-gamma járulékok kisebb spektrum torzítást okoz, 150 keV felett már 1% alatt marad, míg a plasztik detektorral végzett méréseknél jelentős járulékot ad a késő-gamma sugarak detektálása (0,3 MeV-nél 5%, 1 MeV-nél 2%). A plasztik detektoros mérés lényegesen szélesebb energiatarományra vonatkozik, mint az üvegdetektoros, ezért lényegében a plasztik detektorral mért eredmények határozzák meg  $T$  értékét.

Szerzők nem mérték a környezeti anyagokon szóródott neutronok detektálása által okozott háttérrel. A szórt háttér nagyságát a kísérleti körülmények pontos ismerete nélkül még megbecsülni sem lehet. A szórt háttér belemérése a neutroneloszlásba csökkenti az átlag neutronenergiát, vagyis a  $T$  energiaparaméter értékét. Szerzők nem vették figyelembe a szisztematikus-véletlen háttér járulékát sem.

A három különböző háttér forrás (késő-gamma sugárzás, szórt és szisztematikus-véletlen háttér) elhanyagolása miatt az eredményül kapott  $T=1,39$  MeV energiaparaméter érték a valóságosnál lényegesen kisebb.

D) Meadows [Me67] xenon töltésű gázscintillációs hasadási detektorral és két különböző neutron detektorral mérte a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutronjainak energiaspektrumát. A kis energiájú neutronokat 0,003 és 2 MeV között NE-905 Li üveg detektorral detektálta ( $\varnothing 5,08 \times 0,95$  cm) különböző repülési távolságoknál (18,6,



12. ábra

32,7, 134,2 cm). A szisztematikus-véletlen háttérrel a változó terhelést figyelembe véve számította. A szórt háttér mérése a detektorok közé elhelyezett sárgaréz árnyékoló kúp segítségével történt. A késő-gamma sugárzás eloszlását 3 cm repülési távolságnál méréssel határozta meg. 1 és 15 MeV között hidrogén tartalmú folyadék szcintillátor ( $\varnothing 4,75 \times 2,35$  cm) szolgált neutron detektorként. Különböző detektor küszöbérzékenységekkel történtek a mérések: 0,85, 4,0 és 6,5 MeV neutronenergia. Későgamma sugarak nem szóltatták meg a detektort a magas érzékenységi szint miatt.

Maxwell eloszlást, illetve a mérési adatokhoz  $T=1,565$  MeV adódott, illetve a  $0,5 < E_n < 10$  MeV tartományra  $T=1,592$  MeV.

E) Zamyatin, Kroskin, Melnikov és Nefedov [Za70] gázscintillációs hasadási detektorral és  $\varnothing 10 \times 3$  cm méretű plasztik neutron detektorral mérték a spektrumot 50 cm repülési távolságnál, 0,5–6 MeV energiatarományban. A szisztematikus véletlen koincidenciákból eredő háttérrel a mért spektrumból számították. A szórt háttér mérése 20 cm hosszú vas árnyékoló



kúp felhasználásával történt. A neutron detektor érzékenységi küszöbe 60 keV volt gamma energiában, ez Bowman [Bo62] mérései szerint 345 keV neutronenergiával ekvivalens. Ezen küszöbértékekkel számított neutron, illetve késő-gamma sugár eloszlások a 12. ábrán láthatók. A későgamma sugárzás detektálásából eredő háttér járuléka nem elhanyagolható, 0,4 MeV-nél 18% és 1,5 MeV-nél 2%. A szerzők által kapott  $T=1,48\pm0,03$  MeV energiaparaméter érték valószínűleg kisebb mint  $T$  valódi értéke.

### 3.1.2. Mérések más módszerekkel

A hasadási neutron spektrum mérések másik csoportjánál a neutronok energiájának mérése nem időmérésen alapul, így a fellépő problémák is eltérőek. A prompt hasadási neutronoktól nem választhatók külön a hasadás után 2—20 sec-mal keletkező késő neutronok. Amennyiben a neutron detektor gamma sugarakra is érzékeny, a késő-gamma sugárzás mellett az intenzív prompt gamma sugárzás detektálása is eltorzíthatja a spektrumot. A fellépő effektusokat a mérések áttekintésénél vizsgáljuk meg.

#### 3.1.2.1. Mérések fotoemulzióval

A neutronok energiájának mérése a nagy hidrogéntartalmú emulzióban a neutronok által meglökött protonok nyomának kiértékelésén alapul. A mérhető legkisebb neutronenergiát a legrövidebb, még kiértékelhető nyom hosszúsága szabja meg (általában 1—2 MeV neutron energia). A fotoemulzió gamma sugarakra nem érzékeny. A méréseket korrigálni kell az emulzió véges vastagsága miatt (kiszökési valószínűség), figyelembe kell venni az  $(n, p)$  szórás hatáskeresztmetszetének energiafüggését.

Hjalmar és munkatársai [Hj55] 100  $\mu$  vastag Ilford-C2 fotoemulziót exponáltak 0,45 hasadás/sec erősségű forrással 14 napig. Összesen 281 nyomot értékelt ki, de ezek közül a 2 MeV-nél kisebb neutron energiához tartozókat a spektrum vizsgálatánál nem vették figyelembe. A fennmaradó kb. 240 adatot 250 keV-es intervallumokra összegezték, Maxwell eloszlást fittelték hozzá a szükséges korrekciók figyelembevételét után. A fittelésből kapott energiaparaméter:

$$T = 1,402^{+0,098}_{-0,085} \text{ MeV.}$$

A mérés hiányossága a nagy statisztikus hiba. Nincs adat 6,5 és 8 MeV között, 8,5 és 9,5 MeV között, valamint 10 MeV felett. Az elméleti görbe illesztését viszont erősen befolyásolja, hogy az említett intervallumokban 0 vagy 1 esemény van. Meg kell jegyezni, hogy ez volt az első  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutron spektrumra vonatkozó mérés az irodalomban.

Smith és munkatársai [Sm57] 400  $\mu$  vastag Ilford-C2 fotoemulziót exponáltak  $5 \times 10^2$  hasadás/sec erősségű forrással. A kiértékelés módja, az alkalmazott korrekciók megegyeztek a [Hj55] mérésben alkalmazottakkal. Az összesen detektált 1400 eseményt 200 keV-es intervallumokra összegezték 2 és 7 MeV között. Szerzők eredetileg egy kisebb neutron energiákra vonatkozó repülési idő méréssel együtt értékelték ki a fotoemulzióval kapott adatokat, Watt spektrum illesztéssel. Condé [Co65b] külön kiértékelte a fotoemulzióval mért adatokat, Maxwell eloszlást illesztve a mért neutron energia spektrumhoz  $T=1,57\pm0,05$  MeV adódott.



### 3.1.2.2. Mérés „Bramblett-számláló”-val

Különböző elemek, többek között a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutron spektrumát mérte Bonner [Bo61] „Bramblett-számláló”-val [Br60]. A neutronokat polietilén moderátor gömb közepébe helyezett  $^6\text{LiI}(\text{Eu})$  szcintillátorral ( $\varnothing 0,4 \times 0,4$  cm) detektálták. A polietilén gömbök átmérője 5,1 és 30 cm között váltakozott. Egyenként meghatározták a különböző átmérőjű moderátorok esetében a neutron detektálás hatásfokának energia függését termikus neutron energiától 15 MeV-ig, különböző monoenergetikus neutron források felhasználásával. A  $^6\text{LiI}(\text{Eu})$  szcintillátorral történő neutron detektálás a  $^6\text{Li}$  üvegdetektorokhoz hasonlóan a  $^6\text{Li}(n, \alpha) + 4,8$  MeV reakcióban keletkező töltött részecskék detektálásán alapul, a szcintillátor hatásfoka legnagyobb termikus neutron energia esetében. A polietilén moderátor gömb egyrészt termalizálja a különböző energiájú neutronokat, másrészt el is nyeli. Különböző moderátor gömb átmérőknél a két folyamat viszonyának megfelelően a hatásfok energia függése más és más. Ezért két különböző méretű számlálóval mért beütésszámok aránya az energia érzékeny függvénye. Folytonos eloszlású neutron spektrum mérése esetén csak a spektrum 1 paramétere határozható meg ezzel a módszerrel. Az egyetlen mérési adat a 2 különböző méretű detektor beütésszámának hányadosa. Feltételezve, hogy a hasadási neutronok energiaeloszlása leírható Maxwell eloszlással, a mért beütésszám arány csak a Maxwell eloszlás  $T$  energiaparaméterének függvénye lesz:

$$K = \frac{N_1}{N_2} = \frac{N_0 \int_0^{\infty} N(E, T) \cdot \varepsilon_1(E, \Omega_1) dE}{N_0 \int_0^{\infty} N(E, T) \cdot \varepsilon_2(E, \Omega_2) dE} = K(T). \quad (66)$$

A kiértékelésnél a mért spektrum alakját fel kell tételezni, esetünkben a Maxwell eloszlást.  $T$  különböző értékeire ki kell számítani a Maxwell eloszlás energia függésének, a hatásfok energia függésének és a térszögnek ismeretében a mért neutron eloszlást, ezt numerikusan integrálva megkapjuk az összbetűtesszámot. A számolást detektor párokra és  $T$  különböző értékeire elvégezve a mért és számított értékek összevetéséből adódik a  $T$  energiaparaméter legvalószínűbb értéke.

Az  $1,6 \times 10^5$  hasadás/sec erősségű  $^{252}\text{Cf}$  forrást a padlótól 7,2 m magasságban helyezték el. Minden számlálóval 8 mérés történt, mérésenként 15 000 vagy több esemény detektálásával. A környezet háttere a forrás eltávolítása után az összbetűtesszám 1—2%-ának adódott. Öt különböző méretű detektorral végeztek méréseket, ezeket hat detektor párosításban értékelték ki. A kapott eredményeket a 2. táblázatban tüntettük fel:

2. TÁBLÁZAT

Számláló	$T$ (MeV)
13/5,1	1,363
20/5,1	1,364
20/7,6	1,419
30/5,1	1,342
30/7,6	1,372
30/13	1,332

$T$  legvalószínűbb értéke a fentiekből:  $T = 1,367 \pm 0,030$  MeV.

Az ismertetett módszerrel kapcsolatban a legfontosabb elvi probléma, hogy a kiértékelhetőséghez a mérni kívánt, ismeretlen neutron energia eloszlás alakját eleve ismertnek kell feltételezni, ill. rendkívül leszűkül a feltételezhető és ugyanakkor kiértékelhető eloszlások köre, mivel csak 1 szabad paraméter lehet. További problémát jelent, hogy a kísérleti elrendezésből következően nem

mérhető a hasadási neutronok szóródásából eredő háttér, ill. spektrum torzulás. A szerző által mért háttér a forrás eltávolítása után fellépő, a környezetből eredő háttér. A forrás és a detektor tartószerkezetén, a detektort körülvevő anyagokon szóródott neutronok különválasztása a forrásból közvetlenül a detektorba jutó neutronoktól lehetetlen. A szórt neutronok detektálása az átlag neutron energia csökkenését eredményezi, s ez mint megmutattuk, Maxwell eloszlást feltételezve a valóságosnál kisebb  $T$  paraméter értéket eredményez.

A Bramblett-számláló egyaránt érzékeny a prompt és késő neutronokra. Cox [Co58] mérései szerint  $^{252}\text{Cf}$  esetében a neutronok 0,86 %-a késő neutron, a hasadás pillanata után 2–20 sec-mal keletkezik. A késő neutronok energia eloszlását  $^{252}\text{Cf}$  esetében még nem mérték meg, de a  $^{235}\text{U}$  és  $^{239}\text{Pu}$  hasadásánál keletkező késő neutronokra kapott 450 keV átlagenergiát [Ba56] jó közelítésként elfogadhatjuk. A szerző által megadott hatások adatok felhasználásával kiszámítottuk az egy hasadásra eső detektált neutronok számát a 20 és 7,6 cm átmérőjű detektorokra  $T=1,4$  MeV és 1,5 MeV esetében. A kapott beütésszámok, ill. a beütésszám arány:

3. TÁBLÁZAT

Detektor	$T=1,4$	$T=1,5$
	(MeV)	
20 cm-es	$3,873 \times 10^{-5}$	$3,922 \times 10^{-5}$
7,6 cm-es	$7,459 \times 10^{-6}$	$7,601 \times 10^{-6}$
20/7,6	5,07	5,25

A beütésszám arány változása jó egyezésben van a szerző által mért energia érzékenységgel (számolt értékeinknél a beütésszám arány változása  $T$  0,1 MeV-es változására 3,8 %, a mérésekből 4,2 % adódott).

A késő neutronok által adott járuléka ( $\bar{\nu}=3,77$  felhasználásával):

20 cm-es számláló  $2,66 \cdot 10^{-7}$

7,6 cm-es számláló  $1,13 \cdot 10^{-7}$ .

A beütésszám arány  $T$  függésének ismeretében megállapítható, ha a prompt neutronok detektálásából adódó beütésszám  $T=1,5$  MeV-el lenne fittelhető, ezt a késő neutronok járuléka  $T=1,47$  MeV-re csökkenti a vizsgált detektorpár esetében. A többi detektorpárnál a késő neutronok spektrum torzító hatása erősebb, mivel 450 keV neutron energiánál (a késő neutronok átlagenergiája) a párokban szereplő detektorok hatásfokai jobban különböznek, mint a 20 és 7,6 cm-es detektorok esetében, tehát a beütésszám arány erősebben változik.

Megvizsgáltuk, hogy gamma sugarak detektálása mennyiben befolyásolhatja a mért beütésszámokat. A neutron detektor érzékenységi küszöbe 4 MeV  $\alpha$  részecske energiának felel meg, ez a 3,2 MeV gamma-sugár energiával ekvivalens. Smith [Sm56] mérései szerint hasadásonként 0,2 gamma kvantum rendelkezik 3,2 MeV-nél nagyobb energiával, késő-gamma sugárzás ebben az energia tartományban nincs [Jo70]. A küszöb feletti gamma sugárzás átlagenergiája 3,9 MeV. A LiI(Eu) detektor gamma hatásfokát NaI(Tl) detektor hatásfok adataiból számítottuk [Ne65], a polietilénben fellépő abszorbcíót antracénben fellépő abszorbcíóval közelítettük



[Ne65]. A kapott beütésszámok hasadásonként:

20 cm-es számláló  $6,8 \cdot 10^{-9}$

7,6 cm-es számláló  $1,1 \cdot 10^{-8}$ .

A számított értékek a neutron beütésszámok számítási pontosságának határán vannak, figyelembe veendő spektrum torzulást nem okoznak.

Megállapíthatjuk, hogy a Bramblett-számlálóval végzett hasadási neutron spektrum mérésnél a szórt háttér mérhetetlensége és a késő neutronok járulékának figyelembe nem vétele miatt a valóságosnál kisebb  $T$  érték adódott.

### 3.1.2.3. Mérés proporcionális számlálóval

Werle [We70] proton visszalökéses proporcionális számlálóval mérte a neutronok energia spektrumát 0,6—6 MeV energia tartományban. Az 1—6 MeV tartományban Maxwell eloszlást illesztett a mérési eredményekhez, eredményül  $T=1,4$  MeV energiaparaméter érték adódott, a becsült pontosság 5%.

A henger alakú számláló csöveket különböző gázokkal töltötte meg: 1 MeV-nél nagyobb energiáknál 3 atm  $\text{CH}_4$ , 1 MeV alatt pedig 1,5 atm  $\text{Kr} + 1,5$  atm  $\text{H}_2$ , ill. 2 atm  $\text{H}_2 + 0,1$  atm  $\text{CH}_4$  töltésű csövekkel végezte a méréseket. A proporcionális számlálót monoenergiás neutron forrásokkal hitelesítette, a mért proton energia eloszlásból inverz-mátrix technikával számította a neutronok energia eloszlását. A neutronok és késő-gamma sugarak keltette jelek szétválasztása elektronikus jelalak diszkriminációval történt. A szórt háttérrel vas árnyékoló kúp segítségével határozta meg. A különböző forrás-detektor távolságoknál végzett méréseket egyszerű geometriai faktorról normálta össze.

A  $2,7 \cdot 10^7$  hasadás/perc erősségű  $^{252}\text{Cf}$  forrás platinával töltött acél kapszulában helyezkedett el. A neutronoknak a proporcionális számláló eléréséhez 0,6 mm vastag acél és 2,61 mm-re becsülhető platina rétegen kellett áthaladni. Az 1—3 MeV energiájú neutronok 14%-a lép kölcsönhatásba a platinával a megadott anyagmennyiség esetében. A kölcsönhatás jelentős része teljes abszorpciót jelent, de nem hanyagolható el a szóródott, energiát veszített neutronok járuléka sem. Ezen szóródott neutronok detektálása, ill. az általuk okozott hiba korrigálhatatlansága miatt a mért neutronok átlagenergiája, így a  $T$  energiaparaméter értéke a valóságosnál kisebbnek adódott.

A módszer természetesen nem alkalmas a késő és prompt neutronok szétválasztására, de a Maxwell eloszlást csak az 1 MeV feletti tartományra illesztették, így  $T$  meghatározásánál a késő neutronok járuléka nem játszik szerepet.

### 3.1.3. Összefoglalás

Az egyes mérések részletes diszkussziójánál rámutattunk különböző, figyelembe nem vett effektusok spektrum torzító hatására, megállapítottuk, hogy a vizsgált effektusok a valóságosnál kisebb  $T$  értékeket eredményeztek a mérések kiértékelésekor.

Smith et al. mérésénél a késő-gamma és a szisztematikus-véletlen háttér elhanyagolása, Condé et al. mérésénél a szórt, késő-gamma és a szisztematikus-véletlen háttér figyelembe nem vétele, Zamyatin et al. mérésében a késő-gamma sugárzás okozta háttér elhanyagolása 100—150 keV-el csökkentette  $T$  értékét.



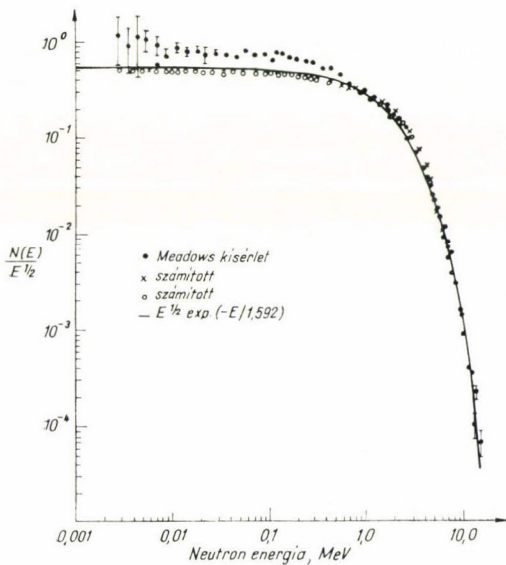
Smith et al. fotoemulziós méréséből adódó  $T=1,57$  MeV, Bowman et al. szög-eloszlás méréséből számított  $T=1,56$  MeV és Meadows repülési idő módszeren alapuló méréséből kapott  $T=1,5$ , ill.  $1,59$  MeV rendkívül jó egyezést mutat. Ezekben a mérésekben a vizsgált spektrum torzító effektusok nem lépnek fel, ill. járulékokat pontosan figyelembe vették.

Az 5. fejezetben megmutatjuk, hogy a hasadási neutronok energia spektruma nem írható jól le egyetlen Maxwell eloszlással a teljes energiatartományban, különböző energiatartományokban más-más  $T$  paraméter érték ad jó leírást. A vizsgált mérési eredmények a  $0,5\text{--}6$  MeV energiatartományra vonatkoznak. Megállapíthatjuk, hogy ezen energiatartományban a Maxwell eloszlás  $T$  energiaparaméterének legvalószínűbb értékeként  $T=1,57$  MeV fogadható el.

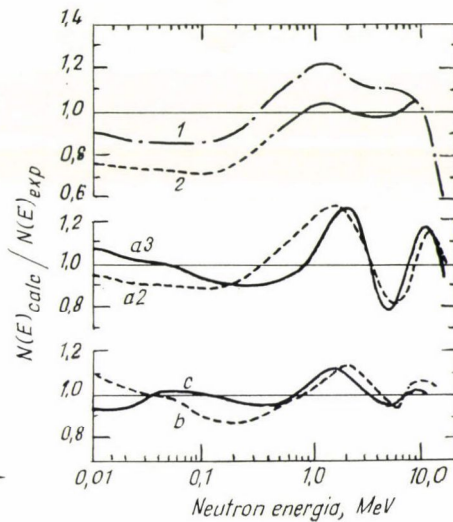
### 3.2. Eltérések a Maxwell eloszlástól

#### 3.2.1. A spektrum alakja $E_n < 0,5$ MeV energiatartományban

Meadows [Me67] mérte meg először a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutronjainak energiaspektrumát a kis energiák tartományában is. Mérései a  $3\text{ keV--}15\text{ MeV}$  neutron energia tartományt fogták át. A mérés technikai adatait a 3.1.1.3. C) pontban ismertettük. A hátterek pontos figyelembevétele után Maxwell eloszlást illesztett a mérési adatokhoz.  $0,5\text{--}10$  MeV között az egyezés rendkívül jó, kis energiáknál viszont szembe-tűnő a jelentős eltérés (13. ábra). Az eltérés kb. 25 %. Különböző elméleti feltevések alapján további számításokat végzett, melyek eredményei a mérési eredményekkel



13. ábra



14. ábra

összevetve a 14. ábrán láthatók. Az alábbiakban az ábra jelöléseinek megfelelően röviden ismertetjük a számításokat:

1. Maxwell eloszlás illesztése a teljes energiatartományban,  $T=1,565$  MeV.
2. Maxwell eloszlás, fittelés  $0,5-10$  MeV között,  $T=1,592$  MeV.
- a2) TKR-ben izotrop párolgás a fragmentekből, 2, ill. 3 párolgási spektrum
- a3) összege (Bowman formula);
- b) anizotrop szögeloszlás 2 párolgási spektrummal

$$\Phi(\vartheta) \sim 1 + 0,43 \cos^{16} \vartheta; \quad (67)$$

- c) izotrop párolgás a fragmentekből (TKR) + nem a fragmentekből eredő neutronok járuléka (izotrop párolgás LAB rendszerben, súlyfaktor  $0,03$ ,  $T=0,18$  MeV).

Számításokat végeztünk a 2.1.2. fejezetben részletezett módszerrel mérési adatok felhasználásával, az egyes fragmentek járulékából építve fel a mért totális neutron spektrumot [Jé70]. A fragmentekből a TKR-ben izotrop eloszlásban kilépő neutronokra Maxwell, ill. egy fragmentre három párolgási (Bowman) spektrumot tételeztünk fel. Eredményeink lényegében megegyeznek a Maxwell eloszlással a LAB rendszerben (13. ábra). Mint a 13., 14. ábrákról látható, egyik esetben sem adódik jó egyezés, a kísérleti adatok alapján nem igazolható egyértelműen egyik feltevés sem. A fittelésből az anizotrópiára, ill. a LAB rendszerben izotrop eloszlású neutronok járulékára adódó számszerű eredmények sem egyeznek meg a más mérésekből nyert adatokkal [Bo62].

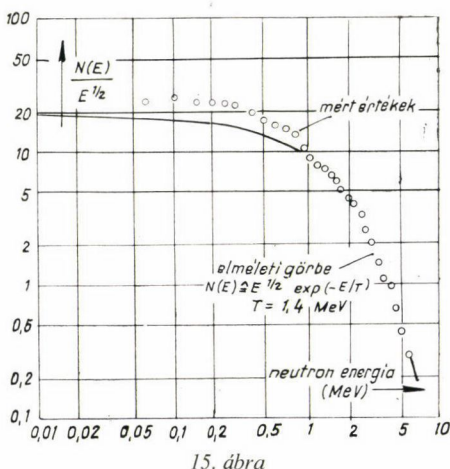
A probléma tisztázása érdekében megmértük a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutronjainak energia spektrumát, eldöntendő vajon nem valamilyen, a kísérleti körülményekből adódó effektus okozza-e a neutron többletet az alacsony energiák tartományában.

Röviddel méréseink befejezése előtt jelent meg Werle közleménye [We70], melyet részletesen a 3.1.2.3. pontban ismertetünk. Szerző  $0,06-1$  MeV neutron energia tartományban jelentős eltérést tapasztalt a  $T=1,4$  MeV paraméterrel számított Maxwell eloszlástól (15. ábra). Mérése nem erősíti meg meggyőzően Meadows eredményeit, mivel  $1$  MeV alatti, ill. felett teljesen különböző töltésű

és méretű számláló csövekkel végezte a mérést, így az  $1$  MeV-nél végződő eltérés oka a detektorok nem pontos összenormálása is lehet.

### 3.2.2. Retardált neutronok

Mind a kísérleti eredmények, mind a különböző alapokról induló számítások egybehangzóan azt mutatták, hogy a neutron energia eloszlás az energiának sima függvénye. Nefedov [Ne69] majd Zamyatin, Nefedov et al. [Za70] a  $^{235}\text{U}$  és a  $^{252}\text{Cf}$  hasadásánál keletkező neutronok energia-spektrumát mérve csúcsokat találtak az energia eloszlásban. Kísérletsorozatát végeztek a csúcsok eredetének tisztázására.



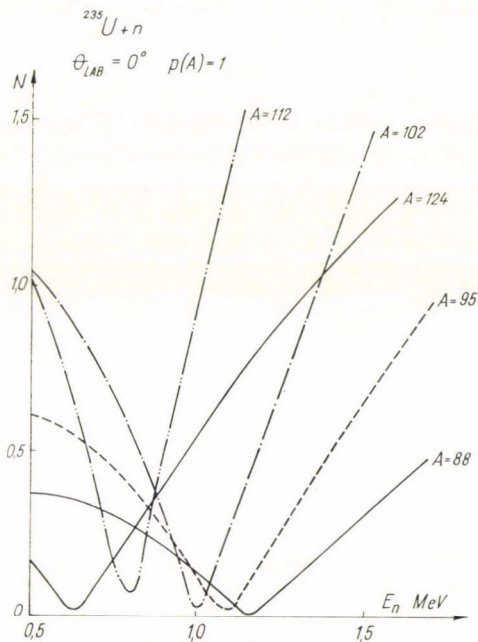


Véleményük szerint a csúcsoakat az  $A=132$  kétszer mágikus tömegszámhoz közeli fragmentekből  $10^{-8}$ — $10^{-9}$  sec-mal a hasadás után emittált „retardált” neutronok okozzák. A továbbiakban röviden áttekintjük a szerzők kísérleteit, rámutatva néhány kísérleti problémára, valamint eltérő értelmezési lehetőségekre, melyek alapján megállapítjuk, hogy a retardált neutronok létezése az eddigi kísérleti bizonyítékok alapján kétséges.

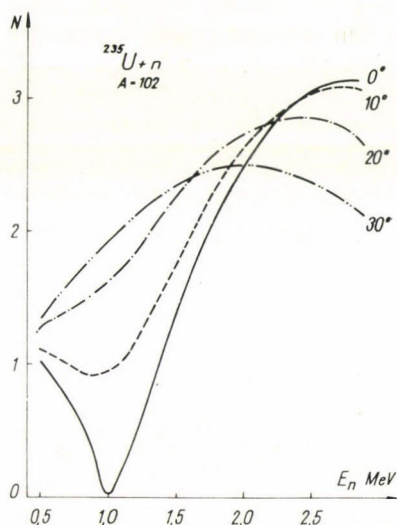
Megmérték a  $^{235}\text{U}$  hasadási neutronjainak energia spektrumát a fragmentek kinetikus energiájának függvényében, csúcsok jelentkeztek 0,75, 1,2, 1,6 és 2,5 MeV neutron energiánál a 80—83 MeV kinetikus energiájú fragmentek spektrumában. A neutron energia felbontás 10% volt 1 MeV-nél, a detektor hatásfokát elméletileg számították. A kalibrálatlan detektorral mért kinetikus energia adatokból *Milton és Fraser* [Mi62] méréseit felhasználva állapították meg a tömegszámot. Kétséges egy ilyen összehasonlítás jogossága, amellet [Mi62] mérései szerint a 80—83 MeV kinetikus energiájú fragmentek tömegszáma 100—111, a 78—80 MeV-hez tartozó tömegszám pedig vagy 112, vagy 130. Ezek után a szerző következtetése, hogy a retardált neutronok emisszióját az  $A=132$ -höz közel első tömegszámú fragmentek nagy kezdeti impulzus momentuma okozza, megalapozatlannak tűnik.

Megmérték a  $^{252}\text{Cf}$  neutronjainak totális spektrumát és a neutronok szög-eloszlását. A  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutronjainak legvalószínűbb energiája 0,75—0,8 MeV, a mért legkisebb energia 0,65 MeV, így ez a kísérlet nem bizonyíték a 0,75 MeV-nél levő csúcs létezésére. A totális spektrumban 1 MeV körül egy bemélyedés látható, viszont  $90^\circ$ -nál az elért mérési pontosság mellett kétséges a völgy létezése.

$0^\circ$  és  $180^\circ$ -ban mérték a spektrumot repülési idő módszerrel, csúcsok csak  $0^\circ$ -nál jelentkeztek.  $0^\circ$ -ban és ahhoz közeli szögekben már más szerzők is figyeltek

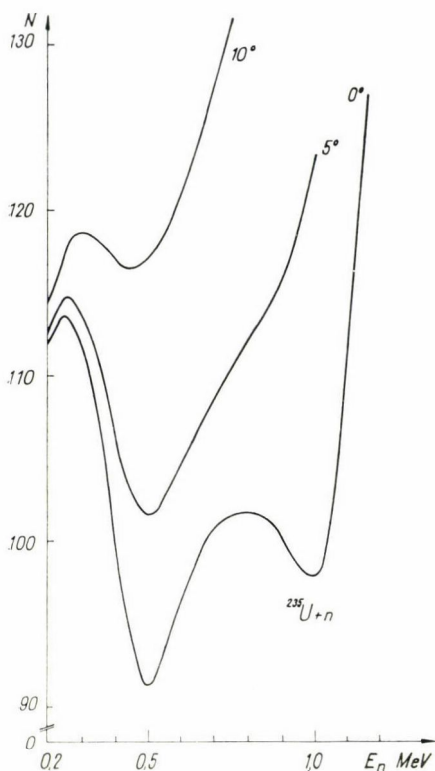


16. ábra



17. ábra





18. ábra

a fragmentekre összegezett szögeloszlásokat  $^{235}\text{U}$  (18. ábra) és  $^{252}\text{Cf}$  (19. ábra) esetére. A különböző paraméterekkel rendelkező fragmentek járuléka úgy adódik össze, hogy több minimum is lehetséges. A  $^{252}\text{Cf}$ -ra vonatkozó adatokat [Sc66, Fr63, St65, Bo63] méréseiből vettük. Hasonló számításokat végeztünk

meg völgyet a neutron spektrumban [Mi65]. Ez a völgy értelmezhető, ha a TKR-ben párolgási spektrumot tételeztünk fel. Az eloszlást a LAB rendszerbe transzformálva fellép egy

$$(\sqrt{E_f} - \sqrt{E})^2 \quad (68)$$

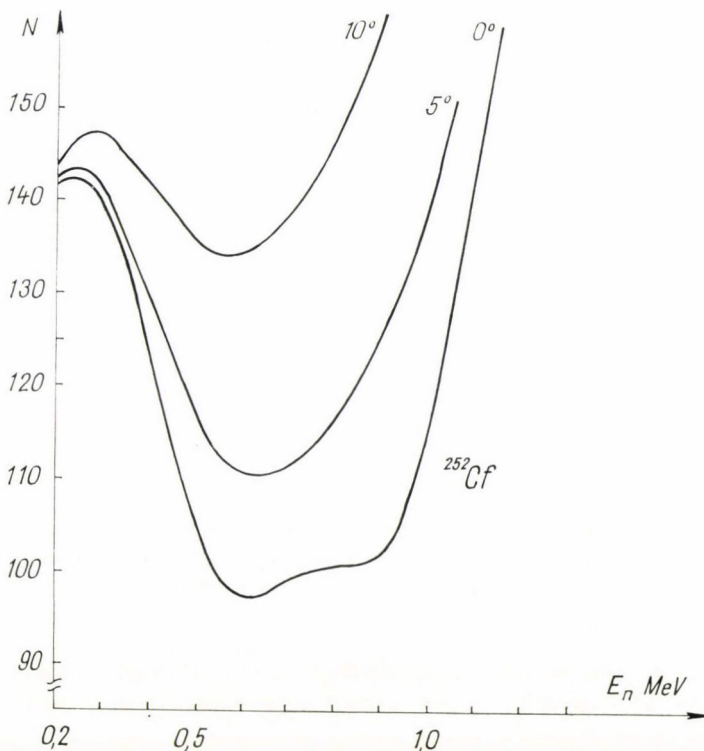
alakú faktor, melynek  $E$  függvényében minimuma van. A 2.2.2. fejezetben leírt módon [Mi65, Sc66, Fr63] adatainak felhasználásával számítottuk a neutronspektrumot  $\Theta = 0^\circ$ -ban különböző tömegszámú fragmentekre (16. ábra). Látható, hogy a tömegszámtól függően más és más energiáknál adódik a minimum. A szerzők által a kinetikus energia függvényében mért spektrumok, amennyiben a mérés valamilyen okból kitért a  $0^\circ$  körüli szögteremtományt, magyarázható a fenti számítások alapján. Bizonyos tömegszámoknál a minimum már a mért legkisebb energia alá esik, másrészt ugyanazon kinetikus energiával rendelkezhetnek különböző tömegszámú magok [Mi62] (3. ábra), az összegezésben a minimum eltűnhet. A 17. ábrán látható az  $A = 102$  tömegszámú fragmentből kilépő neutronok szögeloszlása. Látható, hogy minimum csak a  $0^\circ$ -hoz közeli szögekben jelentkezik. Kiszámítottuk

$$\varphi(E) \sim E^n \cdot \exp\left(-\frac{E}{T}\right) \quad (69)$$

alakú spektrum feltételezésével, az eredmények  $n=0,52$  és  $n=0,50$  esetére a 20. ábrán láthatók. A párolgási spektrumban ( $n=1$ ) megfigyelt bemélyedés a Maxwell eloszlás ( $n=0,50$ ) esetében eltűnik,  $n=0,52$ -nél kicsi, kísérletileg feloldhatatlan. Ezért nem várható a spektrumban bemélyedés több neutron kibocsátása esetén, mivel a több neutron kilépési folyamatot a Maxwell eloszlás írja le [Le59]. Ugyanakkor kevés ( $\sim 1$ ) neutron kilépése esetén az eloszlás a párolgási spektrummal írható le. Ez a tény magyarázhatja az alacsony gerjesztési energiájú ( $A \sim 132$ ) fragmentekből kilépő neutronok energia eloszlásában megfigyelt minimumot.

Zamyatnin et al. [Za70] a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutronjainak kis energiájú tartományát vizsgálta, a korábbi méréssel megegyezően észlelték a 0,75 és 1,2 MeV energiá-

nál megjelenő csúcsot és csúcsoakat találtak 0,085, 0,18–0,2 és 0,45 MeV neutron energiánál is. A méréseket repülési idő módszerrel végezték, a gázszcintillációs hasadási detektorban közel 3 atm nyomású Ar gáz volt. Becslésünk szerint kb. 3 mm vastagságú alumínium rétegen kellett a neutronoknak áthaladni a neutron



19. ábra

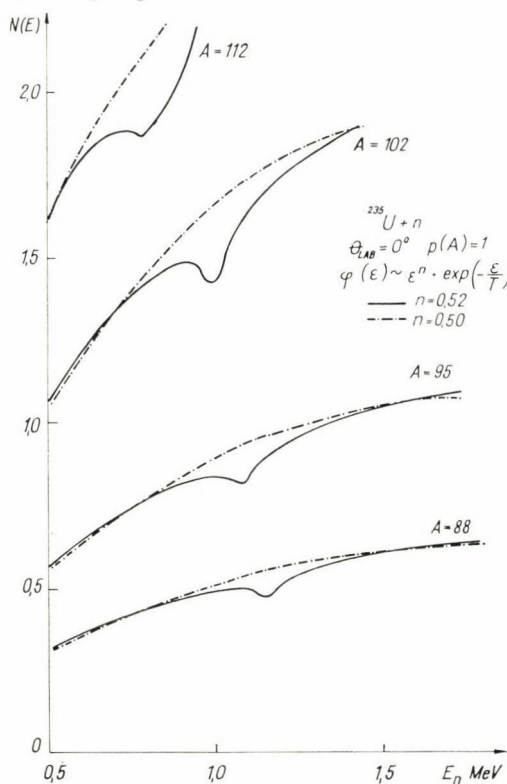
detektor eléréséig. A szórt háttérrel 20 cm hosszú vas árnyékoló kúp segítségével mérték, majd levonták a spektrumból. Kiszámítottuk az alumínium és a vas abszorpciós hatását. A nem abszorbeált neutronok száma  $\Phi(E)=1$  beeső nyalábra:

$$N(E) = (1 - e^{-\mu \cdot l}), \quad (70)$$

ahol  $\mu$  az anyag neutronokra vonatkozó makroszkopikus totális hatáskeresztmetszete,  $l$  az anyag vastagsága. A hatáskeresztmetszeteket [Ho59] adataival számítottuk. Az eredmények a 21. ábrán láthatók. A neutronok energia eloszlására Maxwell eloszlást tételeztünk fel  $T=1,5$  MeV energiaparaméterrel, kiszámoltuk az alumínium abszorbeáló hatását, majd meghatároztuk, hogy a szórt háttér mérésénél az árnyékoló kúp mennyit enged át a közvetlen a detektor felé haladó nyalábból. A szórt háttérbe belemért, a vason átjutott neutronok járulékát levonva az alumínium rétegen áthaladt neutronok eloszlásából a 21. ábrán látható neutron energiaeioszlás adódott.

Figyelemre méltóan jó egyezéssel megkaptuk a szerzők által mért energiaeioszlást (22. ábra).

Fentiek alapján úgy véljük, hogy sem a spektrumban megfigyelt csúcsok létezése, sem a csúcsok eredetének interpretációja a jelenlegi kísérleti bizonyítékok alapján nem tekinthető megalapozottnak.



20. ábra

#### 4. A MÉRŐRENDSZER LEÍRÁSA

A  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező neutronok energia eloszlásának mérését az obnyinszki Fizikai-Energetikai Intézettel kooperációban, a KFKI-ban végeztük. Két különböző intenzitású forrást használtunk, mindkettőt az obnyinszki intézetben készítették. A Cf források lényegesebb adatait a 4. táblázatban foglaltuk össze.

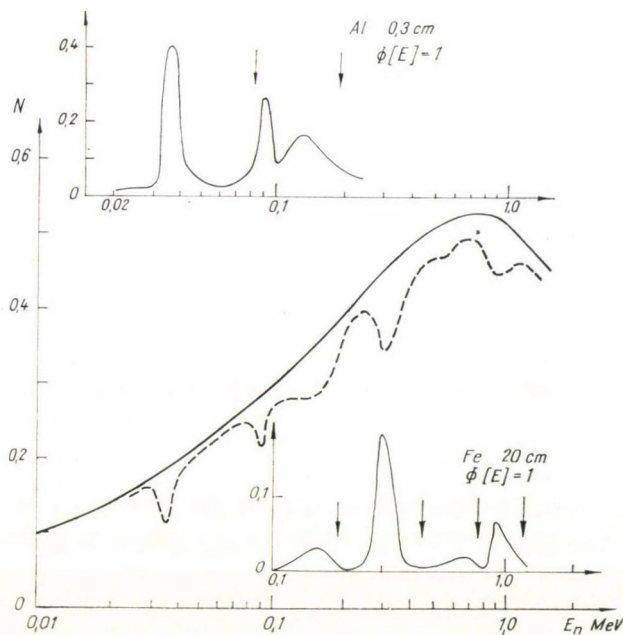
##### 4.1. Mérő-elektronika

A mérőrendszer felépítése teljesen megfelelt a 3.1.1.1. pontban ismertetett mérőrendszernek, ezért itt csak néhány adattal egészítjük ki az általános leírást. A mérőrendszer bloksémája a 23. ábrán látható. A neutronok energiájának mérése a repülési

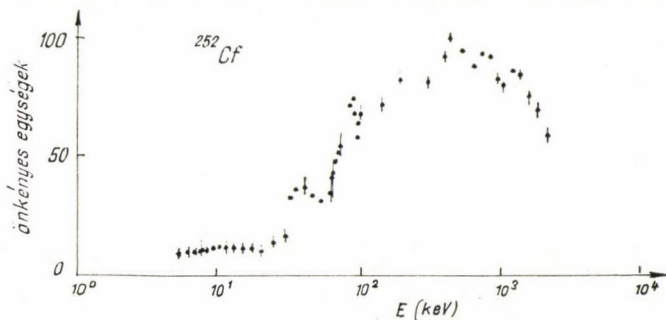


idő módszer alapján történt. A mérőberendezés alapvetően egy időmérő gyors koincidenca ágból áll, egy lassú koincidenca rendszer gondoskodik a megfelelő jelek kiválasztásáról, majd egy sokcsatornás analízátor analízálja és tárolja a feldolgozott eseményeket.

Az elektronikus műszerekkel szemben támasztott követelmények magasak a jelen kísérletben. A megfelelő statisztikus pontosság eléréséhez több száz óra mérési idő szükséges, ez nagyfokú hosszú idejű stabilitást követel. A jó energiafelbontás eléréséhez jó időfelbontást kell biztosítani (repülési idő módszerrel végzett energiamérésnél  $\frac{\Delta E}{E} = 2 \frac{\Delta t}{t}$ ). A jó időfelbontás eléréséhez gyors, alacsony indulási



21. ábra



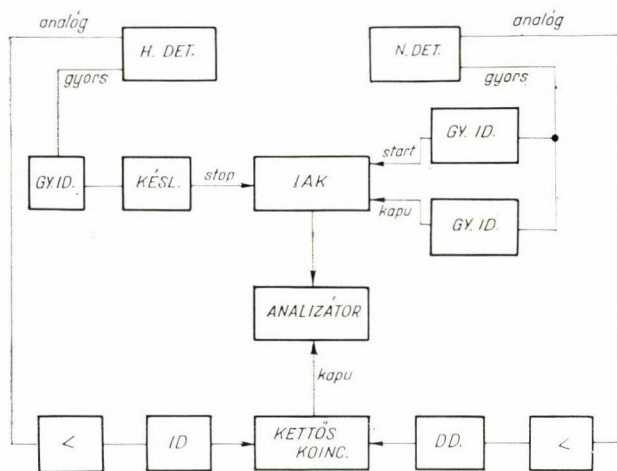
22. ábra

4. TÁBLÁZAT

	1.	2.
Cf réteg átmérője, mm	46	7
Cf súlya, $\mu\text{g}$		0,028
fajlagos aktivitás, bomlás/perc mg		$1,5 \times 10^{12}$
hasadás/perc * **	$1,7 \times 10^5$ $1,6 \times 10^5$	$1,1 \times 10^6$ $1,03 \times 10^6$
backing anyaga	acél	platina
backing vastagsága mm		0,06
backing átmérője mm	50	24

\* A megadott gyorsneutron intenzitásból számított érték ( $v = 3,77$ ).

\*\* Mért hasadási intenzitás.



23. ábra

szintű műszerekre van szükség. Az időfelbontást erősen rontja a különböző amplitúdójú jelek különböző felfutási meredekségéből származó időszórás, ez csökkenthető alacsony indulási szintű rendszerek használatával [Ád68]. A különböző műszerek nagy, statisztikus eloszlású terhelésnek vannak kitéve, biztosítani kell a rendszerek terhelés független működését. Mindezen kívánalmaknak jól eleget tett a KFKI Magfizikai Főosztály Méréstechnikai Osztályán kifejlesztett nukleáris műszercsalád, a felhasznált egységek néhány paraméterét röviden ismertetjük. Az egységes tervezésű műszercsalád további előnye, hogy automatikusan biztosította a megfelelő egységek összeilleszthetőségét (az egységek be- és kimeneti impedanciája  $100 \Omega$ ).

*ND-211 részecske detektor.* A fotoelektronsokszorozó tranzisztorokkal felépített speciális osztólánca (emitterkövetők) biztosítja, hogy beütésszám ingadozás esetén sem tolódhat el a dinódák egyenfeszültsége (nem változhat a fotoelektronsokszorozó erősítése). A detektor 4 jelkimenettel rendelkezik, az anód és az utolsó két dinóda közvetlen áramimpulzusa és egy 2  $\mu\text{sec}$  időállandóval integrált dinóda jel jelenik meg a kimeneteken.

*NK-217 gyors diszkriminátor.* Rövid felfutási idejű jelek beérkezési időpontjának kijelölésére szolgál. Az áramköri konstrukció kis időszórást és késési időt biztosít. A diszkriminációs áramszint helipottal változtatható, a beállított szintet meghaladó bemenő jel egy változtatható szélességű negatív kimenő jelet eredményez. A diszkriminációs szint 100  $\mu\text{A}$  és 5 mA között változtatható, a kimenő jel felfutási ideje kisebb mint 10 nsec. Mérési összeállításunkban gyors diszkriminátorok szolgáltatták az idő-amplitúdó konverter bemenő jeleit.

*NV-238/A lineáris erősítő.* Nagymérvű lineáritás és stabilitás jellemzi. Széles tartományban kettős integrálással és differenciálással formálhatók a jelek.

*NK-215/B integrál/differenciál diszkriminátor.* Előnye a kimenő jel kis időszórása, amit egy harmadik alacsony szintű diszkriminátor biztosít a bemenő jel homlok-éléhez képest. A kimenő jel késleltethető, ez egyben a bemenő jel felfutáskivárást is biztosítja. A diszkriminációs szintnek a bemenő jelek kitöltési tényezőjétől való függetlenségét külön szint-helyreállító áramkör biztosítja. Az idő kijelölő diszkriminátor minimális indulási szintje 20 mV, a legkisebb diszkriminációs szint 0,2 V. A kimenő jel 6 V-os negatív négyszög jel (0,2—2  $\mu\text{sec}$ ).

*NE-604 start-stop rendszerű idő-amplitúdó konverter.* Egy áramgenerátor árama a start és stop jelek közti időintervallumban tölti a töltéstároló kondenzátort, a kondenzátor kapcsain megjelenő feszültség arányos a start és stop jelek beérkezése közti idővel. A felbontóképesség beütésszám függetlenségét a start és stop kapcsolót vezérlő ágak DC csatolás módja biztosítja. A DC csatolásmód következtében a véletlen koincidenenciák száma a bemenő jelek szélességének függvénye, célszerű a minimális szélességű jelekkel vezérelni a konvertert. Mérésünkben a gyors diszkriminátorok kimenetén vágókábelrel rövidítettük a jeleket kb. 5—8 nsec szélességűre. A konverter konverziós tartománya 0,05 és 80  $\mu\text{sec}$  közt változtatható, mérésekben 400 nsec széles konverziós tartományt használtunk. A konverter start bemenete kapuzható, a start jelnek minimum 30 nsec-et kell késnie a kapujelhez képest. A konverter indulási szintje  $-1\text{ V}$ , ezért szükséges az időkijelölést korábban alacsony indulási szintű gyors diszkriminátorokkal biztosítani. A konverter felbontóképessége 80 psec a 400 nsec-es mérési tartományban. Integrális nonlinaritása kisebb mint 0,5%.

Az egész mérőrendszer megfelelő időzítése RK-1 típusú késleltető kábelekkel történt, ugyanezen kábeltípust használtuk az időskála megállapítására is. A kábel késleltetését nagy pontossággal meghatároztuk, a többféle módszerrel pontosan meghatározott késleltetésű RG-29 típusú kábelhez viszonyítva. Az RK-1 kábel késleltetése méréseink szerint 4,939 nsec/m.

A konverter start-kapu jele 80 nsec-mal a start jel előtt érte el a konvertert. A stop ágba a start jelhez képest 400 nsec késleltetést alkalmaztunk, vagyis a start-kapu jelet tekintve 0 időpontnak, a start (neutron) jel késleltetése 80 nsec, míg a stop (hasadási) jelé 480 nsec volt.

A differenciál és integrál diszkriminátor kimenő jeleinek késleltetése 100 nsec volt, a két lassú ági jel az NL-202 gyors koincidenca egységben találkozott. A koin-

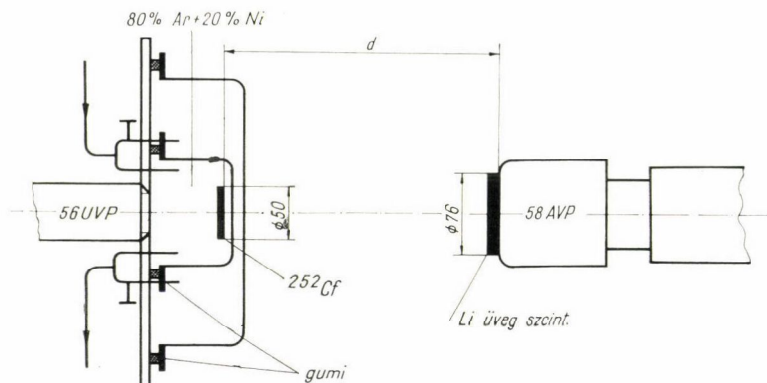


cidencia kör felbontási ideje 500 nsec, kimenete szolgáltatja a konverter jeleit analízáló sokcsatornás analízátor kapujelét. 1024 csatornás KFKI-512/B típusú analízátort használtunk méréseinkben. A csatornaidőt (időskálát) a konverter stop ágának különböző késleltetésével, késleltető kábelek segítségével hitelesítettük. A hitelesítéshez a konverter bemenő jeleit higanykapcsolós impulzusgenerátor szolgáltatja, de a prompt hasadási gamma csúcs késleltetésével is ellenőriztük a csatorna időt. Az analízátor hosszú idejű stabilitása igen jónak bizonyult, non-linearitása kisebb mint 1%. A prompt gamma csúcs szélessége a fél magasságban (FWHM) 4,5 nsec volt.

## 4.2. Detektorok

### 4.2.1. Hasadási detektor

A gázszcintillációs hasadási detektorban elhelyezett Cf réteget 3 vékony rugóval függesztettük fel. A hasadási kamra (24. ábra) 1 mm vastag alumíniumból készült, a neutron detektor irányában 0,3 mm vastag ablakkal, a kamra átmérője 100 mm, hosszúsága 60 mm. A kamrát 80% Ar és 20% N összetételű, 1 atm nyomású gázkeverékkel töltöttük meg. A gáz lassan, folyamatosan áramlott át a kamrán,

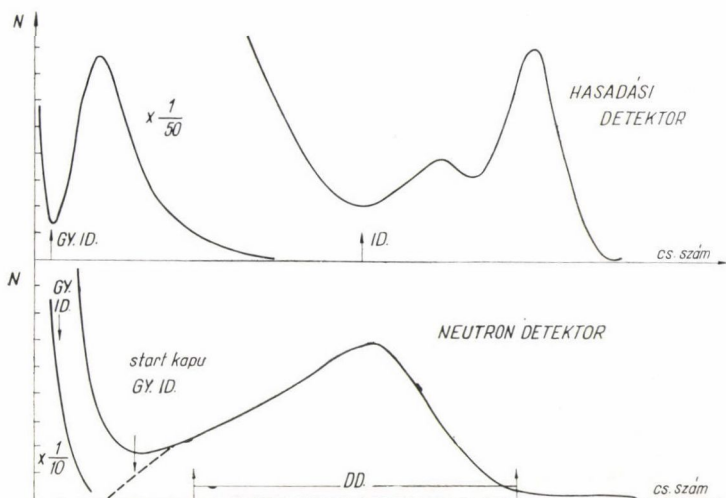


24. ábra

végül a levegőbe távozott, így nem volt szükség a gáz tisztítására és a gáz esetleges kontaminációja is elkerülhetővé vált. A mérések megkezdésekor, a gáz betöltése előtt a kamrát  $3 \cdot 10^{-2}$  Hgmm nyomásra szívtuk le. A leszívás és a gáztöltés ideje alatt a hasadási kamrát egy vastagabb falú, nagyobb kamrába helyeztük el (24. ábra). Megfelelő szelepekkel gondoskodtunk arról, hogy a belső tér és a két kamra közti térrész kb. azonos nyomáson legyen, egyébként a 0,3 mm-es ablak a nagyobb nyomáskülönbség hatására tönkrement volna. A gáztöltés befejezése után a külső kamrát leszereltük.

A gázszcintillációs detektor előnye, hogy lehetővé tette a hasadási termékek 100% hatásfokú detektálását és a hasadási események megkülönböztetését minden más intenzív alfa-, gamma-sugárzás és neutronok okozta háttér ellenére. Egy tipikus

hasadási spektrum (a hasadási detektor jeleinek amplitúdó eloszlása) látható a 25. ábrán. Az első intenzív csúcs a  $^{252}\text{Cf}$  2,2 év felezési idejű  $\alpha$  bomlásából származó  $\alpha$  részecskéknek felel meg, ettől jól elválaszthatók a nagyobb impulzusokat keltő hasadási események. Hosszabb idejű gáz áramoltatás után a könnyű és nehéz fragmentek keltette jelek is megkülönböztethetővé váltak.



25. ábra

Az Ar—N gázkeverék emissziós spektruma döntően az ultraibolya tartományba esik (kb. 3000 Å), ezért kvarcablakos 56UVP típusú fotoelektronsokszorozóval detektáltuk a fotonokat. A szcintilláció lecsengése gyors, kb.  $10^{-9}$  sec nagyságrendű.

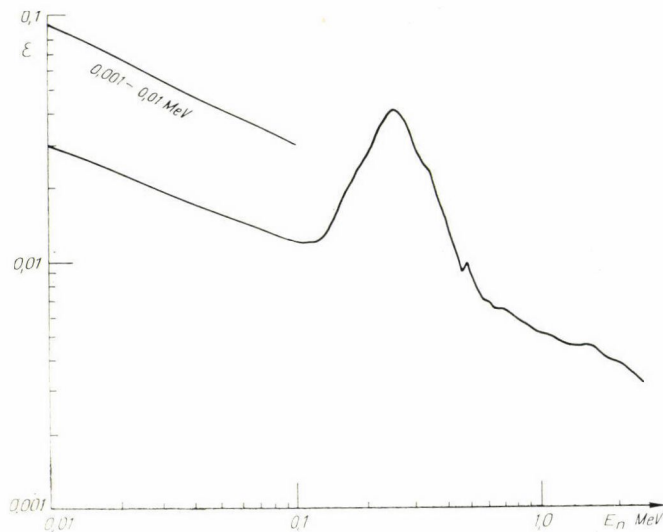
Az időmérő gyors ágban a gyors diszkriminátor szintjét alacsonyra, közvetlenül a zajszint fölé állítottuk be. A kapuzó, lassú koincidencia körben a tényleges hasadási események kiválasztását integrál diszkriminátor végzi. A beállított szintek a 25. ábrán láthatók.

#### 4.2.2. Neutron detektor

A neutronokat 76 mm átmérőjű 3,2 mm vastag NE-905 (Nuclear Enterprises) típusú Ce-aktivált lítium üveg szcintillátorral detektáltuk. A neutron detektálás a  $^6\text{Li}(n, ^4\text{He})^3\text{H} + 4,7 \text{ MeV}$  reakcióban keletkező töltött részecskék detektálásán alapul. Az NE-905 szcintillátor  $^6\text{Li}$ -ban 96%-ra dúsított, 7,3% lítiumot tartalmaz. A szcintilláció lecsengési időállandója  $10^{-7}$  sec. A detektor hatásfoka 99% termikus neutronokra, majd az energia növekedésével gyorsan csökken (1 keV-nél 3,5%, 10 keV-nél 0,76%). A hatásfok energiafüggése lényegében megegyezik a  $^6\text{Li}(n, ^4\text{He})^3\text{H}$  reakció hatáskeresztmetszetének energiafüggésével. Meadows [Me67] méréseiből átvett, általunk is használt hatásfok görbe látható a 26. ábrán. Meadows mért hatáskeresztmetszet adatok felhasználásával határozta meg a Li üveg detektor hatásfokát, a hatásfokot a többszörös szórás figyelembevételével korrigálta [Sc65]. Magasabb energiákon más töltött részecske reakciók is lehetségesek az üveg szcin-

tillátorban, az első versengő reakció, a  ${}^6\text{Li} (n, n'd) {}^4\text{He}$  reakció küszöbe 1,7 MeV. Feltételezve, hogy a töltött részecske fényhozama egyenlő az azonos energiájú elektron fényhozamával, továbbá figyelembe véve, hogy a diszkriminációs szint 0,8 MeV elektron energiának felel meg, az üvegszintillátor 2,5 MeV neutron energia alatt használható. Az üvegszintillátort nagy katódfelületű 58AVP fotoelektronsokszorozóhoz illesztettük.

A neutron detektor jeleinek amplitúdó spektrumát a 25. ábrán tüntettük fel. Jól látható, hogy a neutronoknak megfelelő csúcs egy exponenciálisan csökkenő, gamma sugarak keltette eloszlásra ül rá. Az időmérő ágba a gyors diszkriminátor



26. ábra

szintjét a hasadási ágakhoz hasonlóan alacsonyra állítottuk be. A neutronok keltette jelek kiválasztását differenciál-diszkriminátor végezte. A differenciál-diszkriminátor szintjének beállítását Pu-Be neutron forrás segítségével végeztük, ugyanis a hasadási neutronok a nagy gamma sugár háttérben nem adnak jól elváló csúcsot az amplitúdó spektrumban. Az 1,13 Curie aktivitású Pu-Be forrás és a neutron detektor közé paraffin moderátort helyeztünk, így a lelassított neutronok detektálásával a megfelelő diszkriminációs szinteket egyszerűen beállíthattuk. A 25. ábrán is Pu-Be neutronokkal felvett amplitúdó eloszlás látható. Az idő-amplitúdó konverter terhelésének csökkentésére a start (neutron) ágba kapuztuk a konvertert. A kapujelet gyors integrál-diszkriminátor szolgáltatta, a beállított szintek a 25. ábrán láthatók.

A beállított szinteket naponta ellenőriztük. A legegyszerűbb ellenőrzés a beütésszámok rendszeres mérése volt, néhány jellemző adatot az 5. táblázatban foglaltunk össze.

Amennyiben a beütésszámok változtak, az analízatoron ellenőriztük a beállított szinteket és újra beállítottuk a megfelelő paramétereiket. Ugyanezt az ellenőrzést végrehajtottuk 3 naponként a beütésszámok változatlansága esetén is. Naponta



5. TÁBLÁZAT

Beütésszám/perc	15,5 cm	30 cm	57,5 cm
startjel (neutron gyors ID)	$4,6 \times 10^6$	$9,0 \times 10^5$	$1,2 \times 10^6$
stopjel (hasadási gyors ID)	$5,8 \times 10^5$	$5,7 \times 10^5$	$1,2 \times 10^6$
start-kapu jel (neutron)	$1,2 \times 10^4$	$6,0 \times 10^3$	—
neutron diff. diszkriminátor	$6,8 \times 10^3$	$1,1 \times 10^3$	$2,0 \times 10^3$
hasadási int. diszkriminátor	$1,5 \times 10^5$	$1,6 \times 10^5$	$1,0 \times 10^6$
analizátor kapujel (kettős koincidencia)	150	32	23

ellenőriztük a csatornaidőt, az analizátor linearitását megfelelő késleltető kábelek segítségével. Ugyancsak naponta ellenőriztük a prompt gamma csúcs pozícióját. A mérési eredményeket naponta egyszer olvastuk ki az analizátorból PERFOMOM-70 típusú gyors szalaglyukasztó segítségével. Természetesen a mérések kiértékelésénél csak azokat az eredményeket vettük figyelembe, ahol a mérés időtartama alatt semmilyen lényeges paraméter nem szenvedett változást.

#### 4.3. Háttér mérések és korrekciók

A repülési idő módszerrel végzett neutron spektrum méréseknél fellelő különböző eredetű háttereket részletesen tárgyaltuk a 3.1.1.1. pontban.

A prompt gamma csúcs az analizátor 680. csatornájába esett, 680—1024 közti csatornában mértük a *véletlen koincidenciákból* adódó háttérrel. Ebben az időtartományban a fizikailag reális események jelentkezése kizárt, így az itt mért beütésszám a véletlen koincidenciák számát adja.

A *szisztematikus-véletlen koincidenciák* számát a spektrumból számítottuk. A mérést kiértékelő program az egyéb eredetű hátterek levonása után csatornáról csatornára rendre meghatározta a változó neutron oldali terhelésre jellemző

$$N_n^j = \sum_{i=1}^{\infty} N_n^i$$

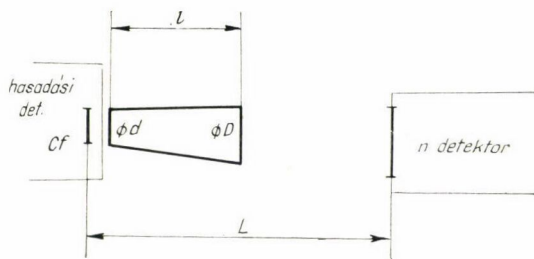
mennyiséget. A  $j$  csatornában a szisztematikus-véletlen koincidenciák számát

$$N_j = \tau N_h N_n^j$$

összefüggés adja meg,  $\tau$  a csatornaidő nsec-ben,  $N_h$  a hasadási beütésszám/nsec (a konverter stop ágának terhelésére).  $N_n^j$ -t a teljes, több száz órás mérésből kapott spektrumból számítottuk, így  $N_j$  is a teljes spektrumra adta meg a háttérrel.

*Szórt háttér.* Mint már megmutattuk, a spektrumot jelentősen torzíttja a detektorokat körülvevő anyagokon, a falakon, a környezeten szóródott neutronok detektálása. A szórt neutronok a szórás során elszorított energiavesztés és a hosszabb repülési út miatt a mért spektrumot „lágyítják”, csökkentik az átlagenergiát. A szórt háttér csökkentése érdekében a detektor könnyű, vékony anyagból készült. A detektorhoz legközelebb eső nagy szórófelület, a padló 1,3 m távolságban volt, a falak és a mennyezet távolsága minden irányban több mint 3 m volt. A szórt háttér meg-

határozására sárgarézből készült árnyékoló kúpot helyeztünk a detektorok közé (27. ábra). A sárgaréz alkotóelemei, a Cu és Zn neutronokra vonatkozó totális hatáskeresztmetszete sima függvénye az energiának, a hatáskeresztmetszet értéke 4–10 barn között változik a kérdéses neutron energia tartományban. Az árnyékoló kúp méreteinek megválasztásánál két szempontot vettünk figyelembe: az árnyékolás



27. ábra

biztosítsa a teljes abszorpciót a vizsgált neutron energia tartományban, ugyanakkor ne töltse ki jelentősen a detektorok közti teret, hogy a szórt neutronok akadálytalanul elérhessék a neutron detektort. Két különböző méretű árnyékoló kúpot alkalmaztunk, ezek adatait a 6. táblázat tartalmazza. A méréssel meghatározott szórt háttér

6. TÁBLÁZAT

	$L=15,5, 30$	$L=57,5$
$l$	6,0	12,0
$d$	5,2	5,0
$D$	6,3	5,8

(Minden adat cm-ben.)

a hasadási beütésszám alapján normáltuk a spektrumhoz. Kielégítő statisztikus pontosság elérése érdekében a szórt háttér hosszabb ideig mértük, mint a spektrumot. A mérési időkre vonatkozó adatokat a 7. táblázatban adjuk meg.

A késő-gamma sugárzás detektálása által okozott spektrum torzítás jelentőségére már a 3.1.1. pontban rámutattunk, ahol közelítő számítások segítségével meghatároztuk plasztik szcintillátorokra a spektrum torzítás mértékét.

Üveg szcintillátor esetében a neutron és késő-gamma detektálás valószínűségének hányadosa néhány egyszerű, kísérleti tényeken alapuló feltevés segítségével könnyen felírható, így megállapítható, milyen idő, ill. energia tartományban lehet jelentős a késő-gamma sugarak járuléka.

Határozzuk meg az egy hasadási eseményekhez tartozó detektált neutronok számát. A neutron detektor hatásfoka:

$$\varepsilon(E) = 1 - \exp(-W/\lambda(E)),$$

ahol  $W$  a szcintillátor vastagsága,  $\lambda(E)$  az átlagos szabad úthossz. Kis energiákon  $\lambda(E)/\sqrt{E} = \text{konstans}$ , [Nu67]. Az  $x$  kis értékeire teljesülő  $1 - \exp(-x) \approx x$  közelítést felhasználva 0,98 cm vastag üveg szcintillátorra

$$\varepsilon(E) = W/\lambda(E) = 0,4/\sqrt{E}$$

Maxwell eloszlást feltételezve a detektált neutronok száma hasadásonként:

$$N(E) = \bar{v} \cdot \sqrt{E} \cdot \exp\left(-\frac{E}{T}\right) \cdot \varepsilon(E) \cdot \Omega = \Omega \cdot 1,49 \cdot \exp\left(-\frac{E}{T}\right),$$



ahol  $\bar{\nu}=3,77$ , az 1 hasadási aktusban kibocsátott neutronok átlagos száma,  $\Omega$  a detektor térszöge. Végrehajtva az  $N(E) \rightarrow N(t)$  transzformációt adódik a hasadási neutronok időeloszlása:

$$N_n(t) = 1,55 \cdot \frac{L^2}{t^3} \cdot \exp\left(-\frac{0,52L^2}{Tt^2}\right), \quad (70)$$

ahol  $t$  a repülési idő nsec-ban,  $L$  a repülési távolság cm-ben. Továbbiakban meghatározzuk a detektált késő-gamma sugarak számát a következő feltevések alapján: a  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál 10 gamma kvantum keletkezik hasadásonként, ezek 6%-a késő-gamma sugárzás, a késő-gamma sugarak kb. 10%-a esik a neutron detektor küszöbe fölé, ezekre a detektor hatásfoka 1% (kiinduló adatainkat megerősíti [Jo70] mérése, a hatásfokra vonatkozóan [Me67] és saját mérésünk). Fentiek alapján a hasadásonként detektált késő-gamma sugarak száma  $6 \cdot 10^{-4}$ -re becsülhető.  $\tau_{1/2}=100$  nsec átlagos félelettartamot feltételezve a detektált késő-gamma sugarak időeloszlása:

$$N_\gamma(t) = \Omega \cdot N_0 \cdot e^{-\lambda t} = \Omega \cdot 6 \cdot 10^{-4} \cdot \exp\left(-\frac{0,693 \cdot t}{100}\right), \quad (71)$$

ahol  $\lambda$  a  $\tau_{1/2}$ -ból számítható bomlási állandó,  $t$  az idő nsec-ban. (70) és (71) segítségével felírható a relatív intenzitás:

$$R(t) = \frac{N_\gamma(t)}{N_n(t)} = 4 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{t^3}{L^2} \cdot \exp\left(\frac{0,52L^2}{Tt^2} - \frac{0,693t}{100}\right). \quad (72)$$

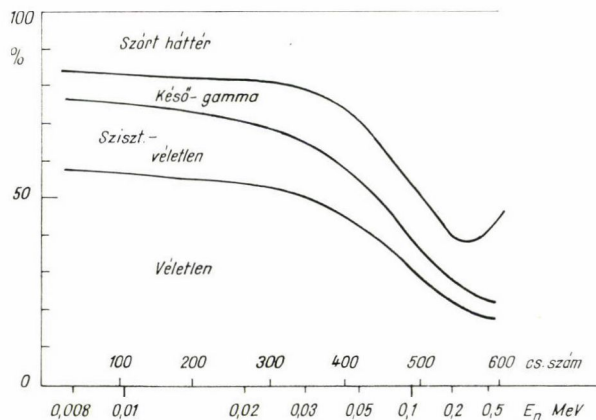
A gyakorlatilag megvalósítható minimális,  $L=3$  cm repülési távolságot feltételezve  $t > 30$  nsec értékekre  $R(t) > 1$  és  $> 10$ , ha  $t > 70$  nsec. Látható, hogy nagy  $t$  és kis  $L$  értékekre nagyon jelentős a késő-gamma sugarak járuléka, jelentősen torzíthatja a mérést, ugyanakkor ez a tény nyújt lehetőséget ahhoz, hogy a késő-gamma sugarak időeloszlását kísérletileg meghatározzuk. Kis repülési távolság és hosszú idő esetén a vizsgált időtartomány jelentős részén tisztán mérhető a késő-gamma sugárzás időeloszlása.

Mindkét forrás esetében megmértük a késő-gamma sugárzás időeloszlását. Az 1. forrás esetében 3,15 cm, a 2. forrás esetében 3,55 cm repülési távolságnál. A mért háttér eloszlást a hasadási beütésszám és a térszögek figyelembevételével normáltuk a mért spektrumhoz. Mint a 7. táblázatban megadott időadatokból látható, a méréshez normált késő-gamma háttéreloszlás mérési ideje 1—1,5 nagyságrenddel nagyobb a neutron eloszlás mérésére fordított időnél, ugyanakkor a mért effektus nem kicsi. Így rendkívüli pontosan sikerült meghatározni a késő-gamma sugárzás eloszlását, a mérés hibájának kiszámításánál a késő-gamma eloszlás mérésének statisztikus hibájától eltekintettünk.

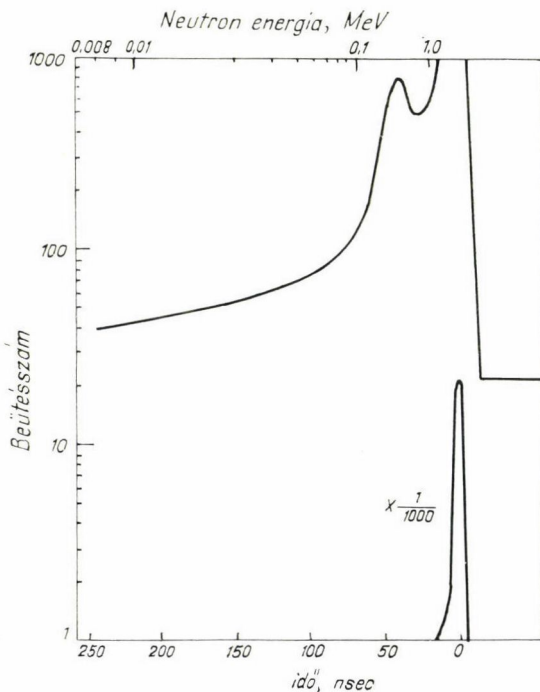
A különböző eredetű hátterek relatív jelentősége változott a különböző mérési távolságoknál. Nagyobb repülési távolságnál nőtt a szórt háttér járuléka, ugyanakkor a késő-gamma sugárzás okozta háttér jelentősége csökkent. A 28. ábrán tüntettük fel a különböző eredeti hátterek relatív nagyságát az energia (idő) függvényében a 30 cm repülési távolságnál végrehajtott mérésre vonatkozóan (hátterek összege = 1). A 29. ábrán 30 cm repülési távolságnál 370 óra alatt mért neutron



spektrum látható, a hátterek levonása nélkül. A jel/zaj viszonyt (esemény/háttér) ábrázoltuk a 30. ábrán. Látható, hogy a 30 cm-nél végrehajtott mérésben a jel/zaj viszony csak 150 keV-nél nagyobb energiákra haladja meg az 1 értéket, a néhány keV energia tartományban  $10^{-2}$  nagyságrendbe esik. Ez a tény érthetővé teszi a rendkívül hosszú mérési időket. A mérési időkre vonatkozó adatokat a 7. táblázatban



28. ábra



29. ábra

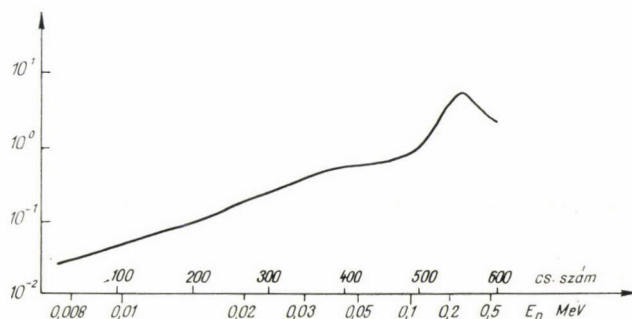
7. TÁBLÁZAT

	15,5 cm	30 cm	57,5 cm
neutron spektrum	291,0	444,5	251,9
szórt háttér	324,4	167,6	407,8
késő-gamma háttér tényleges	81,3	—	25,0
késő-gamma háttér normált	1975,0	7390,4	6571,6

(Minden időadat órában.)

adjuk meg. A  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező neutronok energia spektrumának mérésére fordított összes idő 1993,5 óra volt.

Általában naponta egyszer olvastuk ki az analizátorból az adatokat. Az analizátorhoz kapcsolt gyors szalag-lyukasztó az ICT számítógép által megkívánt kódban perforálta 8 csatornás lyukszalagra az analizátor memóriájában tárolt információt. Minden mérésnél feljegyeztük a mérés időtartamát, valamint a hasadási



30. ábra

események számát. Az MJN1 program leellenőrizte, hogy a lyukszalagon 1024 csatorna tartalma szerepel-e, megkereste a spektrumban a prompt gamma sugárzásnak megfelelő csúcst, meghatározta a csúcs paramétereit (helye, szélessége), valamint a spektrum egy részén mért véletlen koincidencia háttérét. Ugyanez a program összegezte a napi eredményeket, végül 1—1 szalagon rendelkezésre állt a neutron spektrum mérés, a szórt háttér mérés és a késő-gamma sugárzásból eredő háttér mérésére vonatkozó összes adat. A már ismertetett kontroll méréseken túlmenően a spektrumból meghatározott adatok (prompt gamma csúcs helye, szélessége, véletlen háttér) is lehetőséget nyújtottak a további feldolgozásra alkalmas mérések kiválasztására.

A MJN2 program az összegezett eredményeket tartalmazó szalagok felhasználásával számította a neutron energiaeloszlását és a mérés hibáját. A hasadási beütésszám alapján a méréshez normált véletlen, szórt és késő-gamma háttér levonása után a (63) formula alapján meghatározta a szisztematikus-véletlen koincidenciák számát és levonta a mért eloszlásból. A csatornaidő és a repülési távolság ismeretében meghatározta az egyes csatornáknak megfelelő neutron energiát. A 0 időt első közelítésben a prompt gamma csúcs helye adja meg, ezt korrigáltuk a gamma

sugarak repülési idejének figyelembevételével. Az  $N(t)dt \rightarrow N(E)dE$  transzformáció során a csatorna tartalmat végigsoroztuk  $t^3/2(72,3L)^2$  faktorial, így a korábban időben lineáris eloszlásból energiában lineáris eloszlást állítottunk elő ( $t$  és  $L$  a repülési idő, ill. távolság). Továbbiakban az egyes csatornához tartozó energia ismeretében az  $\varepsilon(E)$  hatásokkal végigosztva a spektrumot megkaptuk a neutronok  $N(E)dE$  energiaeloszlását a laboratóriumi rendszerben.

8. TÁBLÁZAT

$E_n$ (keV)	$\Delta E_n$ (keV)		
	15,5 cm	30 cm	57,5 cm
2	0,1		
5	0,3		
10	0,7	0,3	
20	1,8	1,0	
30	3,4	1,7	0,8
100	20,0	10,4	5,0
200	58,8	29,3	14,2
400		83,1	39,5
600		151,2	71,5
800			113,2
1000			142,3

tározásánál figyelembe vettük a neutron detektor vastagságát is, a detektor közép-pontjából számítottuk a távolságot.

A 4,5 nsec felbontási időből és távolságmérés hibájából számított  $\Delta E_n$  energiafelbontás értékeit a 8. táblázatban foglaltuk össze. Látható, hogy az energia növekedésével az energiafelbontás romlik, azonban különböző távolságoknál végzett mérésekkel a teljes vizsgált energiatarományban jó energiafelbontás vált elérhetővé (200 keV alatt  $\Delta E_n < 7\%$ ).

## 5. EREDMÉNYEK ÉS KÖVETKEZTETÉSEK

A  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásnál keletkező neutronok energiaspektrumára vonatkozó méréseink eredményét a 31. ábrán tüntettük fel. A 3. fejezetben megmutattuk, hogy a 0,5–10 MeV energiatarományban a neutronok energiaeloszlása  $T=1,57$  MeV energiaparaméterrel jellemzett Maxwell eloszlással írható le. A 31. ábrán feltüntetett Maxwell eloszlást 0,6–1 MeV tartományban illesztettük a mérési pontokhoz. Az ábráról szembetűnő, hogy 0,5 MeV alatt a mért eloszlás jelentősen eltér a  $T=1,57$  MeV paraméterrel megadott Maxwell eloszlástól. A 32. ábrán külön-külön feltüntettük a különböző repülési távolságoknál mért neutron energiaeloszlást, összehasonlításként ismét a  $T=1,57$  MeV energiaparaméterű Maxwell eloszlást rajzoltuk fel. Jól látható, hogy a három független mérés egybehangzóan mutatja a Maxwell eloszlástól való eltérést. A különböző repülési távolságoknál kapott eredményekből az azonos energiához tartozó mérési eredményeket a statisztikus hibával súlyozva összeadtuk, így adódott a 31. ábrán látható eredő spektrum. (Az ábrákon feltüntetett eredményeket számszerűen is megadjuk a Függelék 12., 13. táblá-

A statisztikus hiba csökkentésének érdekében több csatorna tartalmát összegeztük, végeredményben a közel 700 csatornában mért eloszlást 15–20 pontban adtuk meg.

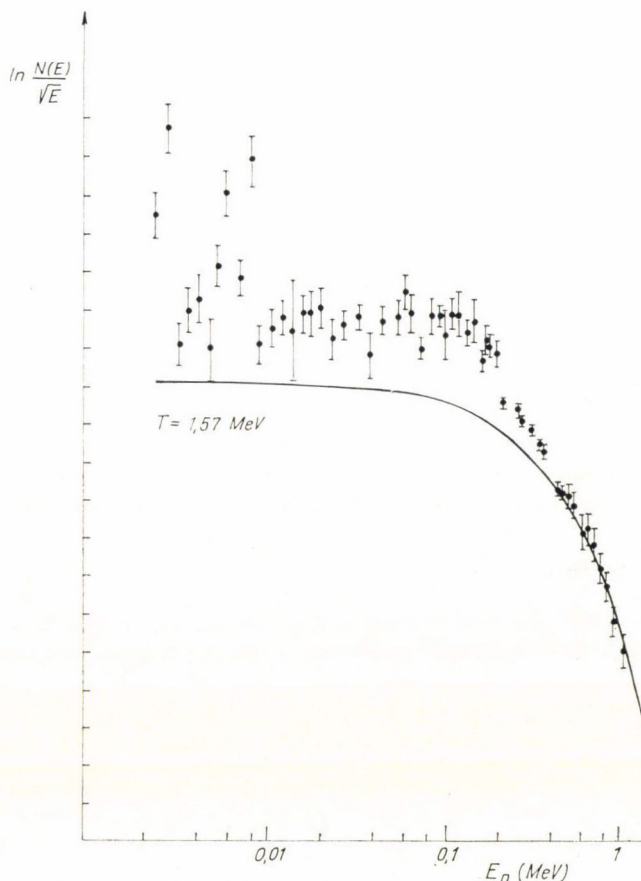
Az energiamérés pontosságát, az energiafelbontást, az időfelbontás és a távolságmérés hibája szabja meg:

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2 = 2 \left[ \left(\frac{\Delta L}{L}\right)^2 + \left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2 \right].$$

$\Delta L$ , a távolságmérés hibája mindhárom repülési távolság esetében 0,02 cm-re becsülhető. Az  $L$  repülési távolság megha-



zatában. (A statisztikus hiba mindhárom mérésben csökken az energia növekedésével. A 15,5 cm repülési távolságnál végrehajtott mérésekből kapott eredmények a 9 keV alatti energiákon nagy szórást mutatnak. Ezen energiatartományban a neutron detektor hatásfoka rendkívül gyorsan változik. Lehetséges, hogy a nem eléggé pontos energia meghatározásából (idő és távolságmérés, összegezés) eredő hiba okozza az eredmények nagy szórását.



31. ábra

Megállapíthatjuk, hogy  $E_n < 0,5$  MeV tartományban a neutronok energia eloszlása nem írható le a  $0,5\text{--}10$  MeV tartományt jól leíró  $T = 1,57$  MeV energia-paraméterrel megadott Maxwell eloszlással, a mérési eredmények jelentős többletet mutatnak a számított értékekhez képest.

Kluge számításai [K171] azt mutatják, hogy a Maxwell eloszlás energiaparamétere függ attól, hogy milyen energiatartományban illesztjük a mérési vagy számított pontokhoz a Maxwell eloszlást. Számításait a 2.2.2. fejezetben leírt módon végezte, az egyes fragmentekből kilépő neutronok járulékáiból építette fel a totális

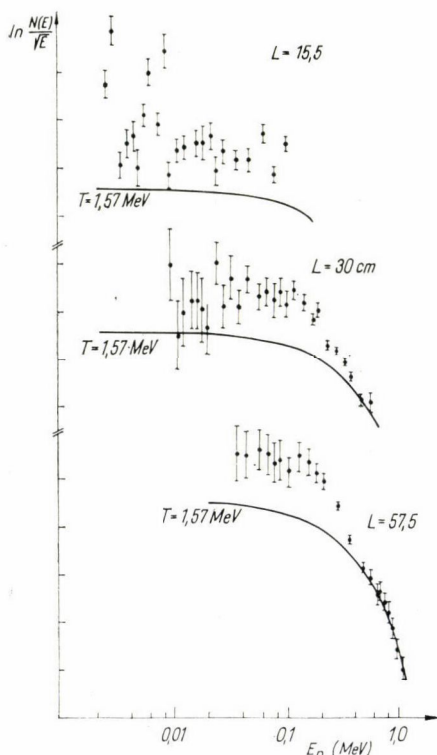
spektrumot. Az egyes fragmentekből kilépő neutronok energiaspektrumára a TKR-ben Maxwell eloszlást tételezett fel, majd a LAB rendszerben transzformálás és összegezés után kapott totális neutron spektrumhoz Maxwell eloszlást illesztett. A 9. táblázat MAX jelű oszlopa tartalmazza a különböző energia tartományokra való illesztésből adódó  $T$  paraméter értékeket.

Vizsgáljuk meg, hogy a mérési adatokból milyen  $T$  paraméter értékek számíthatók az energia eloszlás kis energiájú tartományára vonatkozóan. Jelen mérésen

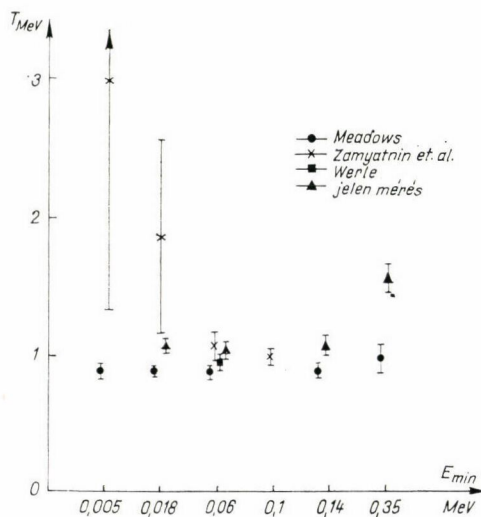
9. TÁBLÁZAT

Energia tartomány (MeV)	$T$ (MeV)	
	MAX	MAX-AN
0,003—15	1,405	1,384
0,003—10	1,449	1,391
0,003—6	1,521	1,424
0,003—2	1,671	1,295
0,003—1	1,741	1,063
1—15	1,365	1,375
0,5—2	1,599	1,595

kívül számításokat végeztünk Meadows [Me67], Zamyatin et al. [Za70] és Werle [We70] mérésére vonatkozóan is. A mért eloszlásokat a 0,6—1 MeV energiatartományban illesztettük egymáshoz, majd  $E_{\min} - E_{\max}$  energiatartományban Maxwell eloszlást illesztettünk a mérési pontokhoz. Az eredményeket a 10. táblázatban és a 33. ábrán foglaltuk össze. Zamyatin et al. méréséből kapott  $T$  paraméterek nagy hibáját és a többi mérestől való nagy eltérést a spektrumban megfigyelt csúcsok okozzák (3.2.2. fejezet). Látható, hogy az 1 MeV alatti tartományra illesztett Maxwell eloszlás paramétere minden esetben jelentősen eltér a nagyobb energiáknál jó leírást adó  $T = 1,57$  MeV-től.



32. ábra



33. ábra

Megkísérelhetjük, hogy a kis energiájú tartomány leírására is Maxwell eloszlást vezetünk be. A 35. ábrán tüntettük fel a  $^{252}\text{Cf}$  spontán hasadásánál keletkező neutronok energiaspektrumára vonatkozó mérések 1 MeV alatti tartományát, valamint 2 Maxwell eloszlást  $T=1,57$  és  $T=1,30$  MeV energiaparaméterrel. A  $T=$

10. TÁBLÁZAT

Szerzők	$E_{\min}$	$E_{\max}$	$T$	$T\Delta$
Meadows	0,004	0,9	0,893	0,049
	0,018		0,893	0,033
	0,059		0,878	0,038
	0,140		0,913	0,048
	0,340		0,999	0,102
Zamyatin	0,005	1,05	3,003	1,672
	0,016		1,870	0,700
	0,060		1,067	0,103
	0,100		1,006	0,052
Werle	0,060	1,0	0,962	0,060
Jéki	0,011	1,07	1,123	0,040
	0,021		1,076	0,033
	0,037		1,048	0,039
	0,075		1,049	0,047
	0,146		1,103	0,066
	0,370		1,589	0,097

$=1,57$  MeV paraméterrel jellemzett Maxwell eloszlást 0,6—1 MeV között a mérési eredményekhez, a  $T=1,30$  MeV-el megadott eloszlást 0,6—1 MeV között a  $T=1,57$  MeV-es eloszláshoz illesztettük. A  $T=1,30$  MeV-el leírt Maxwell eloszlás jól leírja a spektrum kis energiájú tartományát. Természetesen az egyezés csak ilyen leírás lehetőségét igazolja, a  $T$  paraméter pontos értékét a mérési adatokhoz történő illesztésből kell meghatározni.

A hasadási neutronok energia spektruma 2 Maxwell eloszlás összegével írható le a laboratóriumi rendszerben:

$$N(E) = a_1 K_1 \sqrt{E} \exp(-E/T_1) + a_2 K_2 \sqrt{E} \exp(-E/T_2), \quad (73)$$

$$a_1 + a_2 = 1 \quad \text{és} \quad K_i = \frac{1}{T_i^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}.$$

A legújabb mérések azt mutatják, hogy 10 MeV feletti energiákon sem megfelelő a középső energiatartományt jól leíró eloszlás, így a neutronok energiaspektrumának leírására esetleg 3 Maxwell eloszlás összegét kell bevezetni. Meg kell jegyezni, hogy a több Maxwell eloszlás összegével történő leírás fizikailag nem interpretálható, csak gyakorlati (pl. reaktortervezési) célokra használható egyszerű összefüggést ad meg.

A továbbiakban röviden áttekintjük a „többlet” neutronok fellépésének egy lehetséges interpretációját. Az elméleti áttekintésben mindenütt a TKR-ben történő

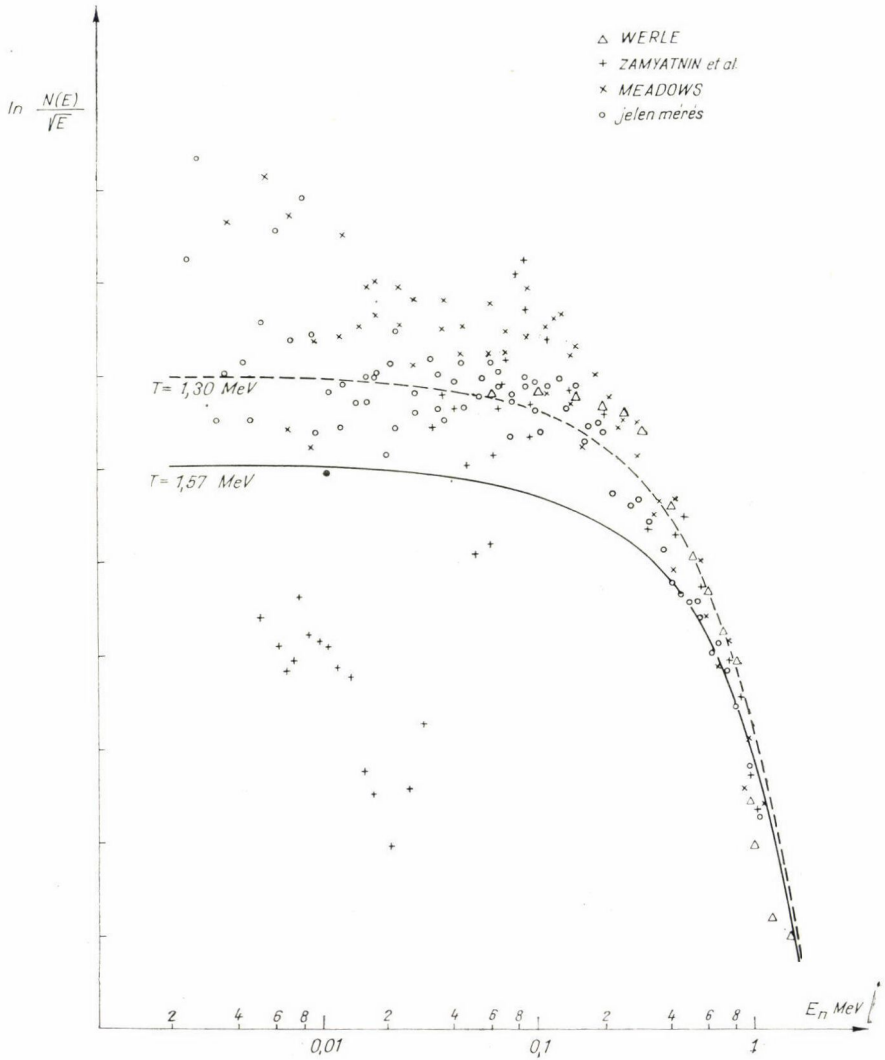


izotrop párolgás esetére szorítkoztunk. Vizsgáljuk meg, hogy az anizotrópia megengedése mennyiben változtatja meg a LAB rendszerbeli neutron eloszlást. Tegyük fel, ha a neutron emisszió anizotrop, az eloszlás szimmetrikus  $90^\circ$ -ra a TKR-ben:

$$\Phi(\varepsilon, \vartheta) = \Phi(\varepsilon)(1 + b \cos^2 \vartheta). \quad (74)$$

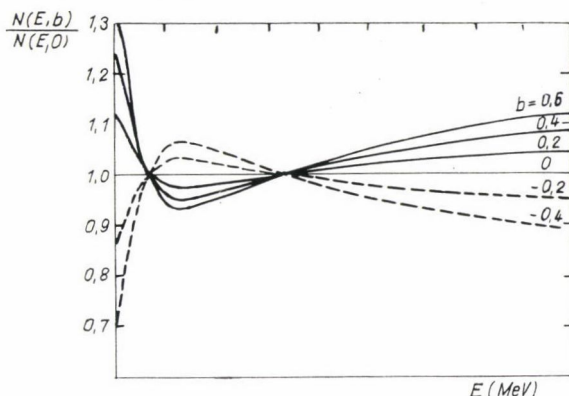
Ekkor a LAB rendszerbeli neutron energia eloszlás:

$$(NE) dE = \int \frac{\varphi(\varepsilon)[1 + b(E - E_f - \varepsilon)^2/4E_f]}{4(\varepsilon E_f)^{1/2}(1 + b/3)} dE. \quad (75)$$



34. ábra

A feltételezett típusú anizotrópia megváltoztatja az energia spektrumot, de változatlanul hagyja a  $\sqrt{E}$  függést kis energiákon. A 35. ábrán [Te59] számításai alapján anizotrop/izotrop eloszlás arányok láthatók az energia függvényében  $b$  anizotrópia paraméter különböző értékeire.  $b > 0$  értékekre az anizotrópia csökkenti a neutron hozamot 0,7 és 3 MeV között, míg másutt növeli. Az anizotrópia feltételezése a kísérletileg megfigyelt kis energiájú „többlet” neutronokhoz vezet.



35. ábra

Bowman et al. [Bo62]  $11,25^\circ$ – $168,75^\circ$  szögtartományban mérték a  $^{252}\text{Cf}$  hasadási neutronjainak szögeloszlását. Eredményeiből arra következtethetünk, hogy nincs  $P_2(\cos \vartheta)$  típusú anizotrópia.

A 11. táblázatban idézzük Bowman eredményeit. Az energiaeloszlást 2, illetve 3 párolgási spektrum összegével írta le.  $T_i$  a maghőmérséklet,  $\alpha_i$  súlyfaktor, izotrópia vagy anizotrópia feltételezésével.  $S^2$  az illesztés jóságára jellemző  $\chi^2$  jellegű mennyiség,  $b$  az illesztésből kapott anizotrópia paraméter.

11. TÁBLÁZAT

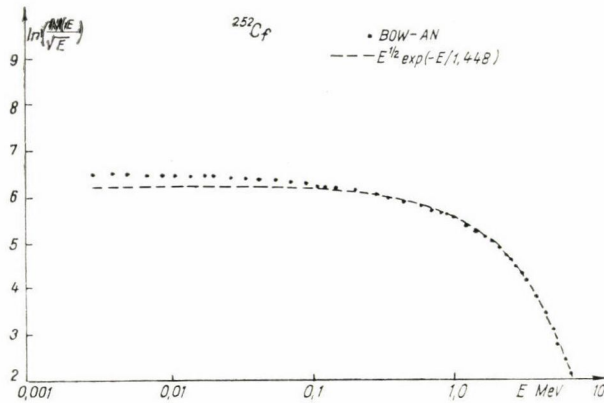
$S^2$	$\begin{cases} T \\ \alpha \end{cases}$			$b$
	1	2	3	
6,60	0,9941	0,3729	0,0732	$\equiv 0$
	0,5720	0,4061	0,0219	
6,59	0,9906	0,3682	0,0699	$0,16 \pm 0,12$
	0,5774	0,4020	0,0206	
10,30	0,2389	0,8729	—	$\equiv 0$
	0,2570	0,7430	—	
10,29	0,2404	0,8738	—	$-0,015 \pm 0,014$
	0,2583	0,7417	—	

Látható, hogy az anizotrópia feltételezése nem javítja az illesztés jóságát és a kapott anizotrópia paraméter értékek gyakorlatilag nullát adnak. Az  $(1 + b \cos^2 \vartheta)$  jellegű anizotrópia létezését kizárhatjuk. Amennyiben anizotrópia van, erősen előrehátra irányuló jellegű kell legyen.

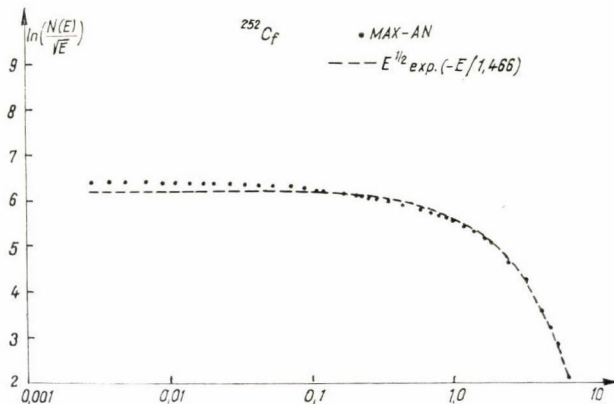
Meadows [Me67] megvizsgálta egy

$$\Phi(\varepsilon, \vartheta) \sim \Phi(\varepsilon)(1 + 0,43 \cos^{16} \vartheta) \quad (76)$$

alakú TKR-beli spektrum leírás lehetőségét. Ez az eloszlás a  $\cos \vartheta$  nagy hatványkitevője miatt rendkívül erősen előre-hátra irányuló szögeloszlást ad a TKR-ben. A LAB rendszerbeli spektrumot 2 TKR-ben anizotrop párolgási spektrum összegével írta le. A számított és mért értékek összevetése a 14. ábrán látható. Kis energiákon relatíve jó egyezést kapott, jobbat, mint más feltételezésekkel kiindulva.



36. ábra



37. ábra

Kluge [K171] (76) alakú anizotrop eloszlást tételezett fel az egyes fragmentekből kilépő neutronokra. Számításokat végzett a TKR-ben Bowman típusú spektrum (36. ábra) és Maxwell eloszlás (37. ábra) feltételezésével. A számítások eredményeit a pontok jelzik az ábrákon, a kihúzott vonal a számított pontokhoz az 1—10 MeV tartományban illesztett Maxwell eloszlás. A számított értékek eltérése a Maxwell eloszlástól teljesen hasonló jellegű a kísérleti eredményeknél tapasztalt eltéréssel.



## 6. FÜGGELÉK

## 12. TÁBLÁZAT

$E_n$ (MeV)	$N(E)$	$\frac{\Delta N(E)}{N(E)}$ (%)	
0,0024	0,768	5,9	A
0,0027	1,019	6,4	A
0,0032	0,632	5,7	A
0,0036	0,742	6,0	A
0,0042	0,814	6,3	A
0,0046	0,752	7,7	A
0,0051	0,984	5,4	A
0,0059	1,271	5,7	A
0,0070	1,114	4,7	A
0,0080	1,621	6,7	A
0,0090	1,268	15,1	B
0,0092	1,034	5,6	A
0,0106	1,221	5,2	A
0,0106	1,021	14,8	B
0,0120	1,202	15,0	B
0,0122	1,321	4,9	A
0,0140	1,362	13,8	B
0,0160	1,460	12,1	B
0,0160	1,543	5,6	A
0,0175	1,477	12,4	B
0,0180	1,654	7,1	A
0,0195	1,435	13,2	B
0,021	1,821	5,8	A
0,023	1,653	6,0	A
0,023	2,059	11,6	B
0,027	1,854	8,7	B
0,027	1,942	4,9	A
0,032	2,275	9,1	B
0,034	2,271	11,2	C
0,035	2,129	4,3	A
0,037	2,153	7,2	B
0,040	2,432	10,1	C
0,044	2,655	5,8	B
0,045	2,412	5,1	A
0,055	2,915	8,3	C
0,055	2,749	5,4	B
0,060	3,123	4,2	A
0,065	3,049	6,1	B
0,065	3,108	8,4	C
0,075	3,219	8,5	C
0,075	3,177	7,1	B
0,075	2,935	3,8	A
0,085	3,495	6,3	B
0,086	3,489	8,2	C
0,095	3,529	5,8	B
0,095	3,754	3,1	A
0,101	3,621	7,3	C
0,110	3,999	4,2	B
0,121	4,198	6,1	C
0,135	4,205	3,6	B
0,146	4,488	5,8	C
0,165	4,334	2,9	B

12. Táblázat folytatás

$E_n$ (MeV)	$N(E)$	$\frac{\Delta N(E)}{N(E)}$ (%)	
0,175	4,712	4,2	C
0,180	4,703	3,0	B
0,200	4,851	3,5	C
0,220	4,477	1,7	B
0,270	4,850	1,9	B
0,276	4,879	1,6	C
0,315	4,989	1,5	B
0,346	5,012	1,6	C
0,370	5,090	2,0	B
0,445	5,094	2,2	B
0,463	5,175	1,9	C
0,520	5,428	3,5	B
0,544	5,379	3,1	C
0,628	5,385	4,5	C
0,661	5,597	4,4	C
0,729	5,602	4,0	C
0,792	5,611	4,4	C
0,852	5,449	4,3	C
0,938	5,214	4,3	C
1,073	5,132	4,8	C

Repülési távolságok: A — 15,5 cm, B — 30 cm,  
C — 57,3 cm.

Vessük össze a 9. táblázatban a MAX-AN oszlopban összefoglalt  $T$  paraméter értékeket a 10. táblázatban található  $T$  paraméterekkel. A 9. táblázatban TKR-beli anizotrop Maxwell eloszlásból számított spektrumhoz a LAB-ban illesztett Maxwell eloszlás paraméterei szerepelnek (elméleti számítás), a 10. táblázatban a

kísérleti eredményekből származtatott paraméter értékeket találjuk. A 0,003—1 MeV energiatartományra a paraméterek rendkívül hasonlóak, mind az elmélet, mind a kísérlet 1 MeV körüli értékeket ad.

13. TÁBLÁZAT

$E_n$ (MeV)	$N(E)$	$\frac{\Delta N(E)}{N(E)}$ (%)
0,0090	1,054	5,2
0,0106	1,191	4,9
0,0120	1,307	4,6
0,0160	1,527	5,0
0,0177	1,602	6,1
0,020	1,729	5,3
0,023	1,713	5,3
0,027	1,919	4,2
0,033	2,164	3,6
0,038	2,232	5,8
0,045	2,507	3,8
0,055	2,794	4,5
0,065	3,069	4,9
0,075	3,010	3,1
0,085	3,493	4,9
0,095	3,699	2,7

Megállapíthatjuk, hogy erős indikáció van annak feltételezésére, hogy a Maxwell eloszlástól a kis energiák tartományában tapasztalt eltéréseket a TKR-beli erősen anizotrop szögeloszlású neutron eloszlásra vezethetjük vissza. Ez az összefüggés nem bizonyított, további mérésekre van szükség. A fizikailag érdekes információ, a neutronok TKR-beli energiaeloszlása egyértelműen tisztázható lesz, ha ismeretessé válik az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok szög- és energiaeloszlása a teljes szög- és energiatartományban.

## IRODALOM

- Ád68. *Ádám, A., Jéki, L., Pálka, G.*, KFKI Közlemények 16, 231, 1968.  
 Ba56. *Batchelor, R., Hyder, H. R.*, J. Nucl. Energy, 3, 7, 1956.  
 Be36. *Bethe, H.*, Phys. Rev. 50, 332, 1936.  
 Bi54. *Birks, J. B.*: Scintillation Counters. Pergamon Press Ltd., London, 1954.  
 Bo52. *Bonner, T. W., Ferrell, R. A., Rinehart, M. C.*, Phys. Rev. 87, 1932, 1952.  
 Bo61. *Bonner, T. W.*, Nucl. Phys. 23, 116, 1961.  
 Bo62. *Bowman, H. R., Thompson, S. G., Milton, J. C. D., Swiatecki, W. J.*, Phys. Rev. 126, 2120, 1962.  
 Bo63. *Bowman, H. R., Milton, J. C. D., Thompson, S. G., Swiatecki, W. J.*, Phys. Rev. 129, 2133, 1963.  
 Br60. *Bramblett, R. L., Ewing, R. I., Bonner, T. W.*, Nucl. Instr. and Meth. 9, 1, 1960.  
 Ca58. *Cameron, A. G. W.* Can. J. Phys. 36, 804, 1958.  
 Co58. *Cox, S., Fields, P., Friedman, A., Sjöblom, R., Smith, A.*, Phys. Rev. 112, 960, 1958.  
 Co65. *Condé, H., Düring, G.*, Arkiv för Fysik 29, 313, 1965.  
 Er60. *Ericson, T.*, Advances in Phys. 9, 425, 1960.  
 Er66. *Erba, E., Facchini, U., Saetta-Menichella, E.*, Nucl. Phys. 84, 595, 1966.  
 Fa70. *Facchini, U., Saetta-Menichella, E.*, Acta Phys. Polonia A38, 537, 1970.  
 Fr51. *Frey, H. B., Grim, W. M., Preston, W. M., Gray, T. S.*, Phys. Rev. 82, 372, 1951.  
 Fr63. *Fraser, J. S. et al.* Can. J. Phys. 41, 2080, 1963.  
 Gi65. *Gilbert, A., Cameron, A. G. W.*, Can. J. Phys. 43, 1446, 1965.  
 Hi52. *Hill, D. H.*, Phys. Rev. 87, 1034, 1952.  
 Hj55. *Hjalmar, E., Slätis, H., Thompson, S. G.*, Arkiv för Fysik 10, 357, 1955.  
 Ho59. *Howerton, R. J.*, Report UCRL-5226 (Revised), 1959.  
 Ho67. *Honecker, R., Grässler, H.*, Nucl. Instr. and Meth. 46, 282, 1967.  
 Jé70. *Jéki, L., Kluge, Gy., Kozma, Gy., Lajtai, A., Dyachenko, P. P., Kuzminov, B. D.*, Proc. Second Conf. Nuclear Data for Reactors, Helsinki, 1970; IAEA, Vienna Vol. II. p. 87, 1970.  
 Jé71a. *Jéki, L., Kluge, Gy., Lajtai, A.* Report KFKI-71—9 1971.  
 Jé71b. *Jéki, L., Kluge, Gy., Lajtai, A.*, Report KFKI-71—35, 1971.  
 Jé71c. *Jéki, L., Kluge, Gy., Lajtai, A., Dyachenko, P. P., Kuzminov, B. D.*, Report KFKI-71—63, 1971.  
 Jé71d. *Jéki, L., Kluge, Gy., Lajtai, A., Dyachenko, P. P., Kuzminov, B. D.*, Proc. Consultants' Meeting on the Prompt Fission Neutron Spectra, IAEA Vienna 1972. p. 81.  
 Jé71e. *Jéki, L., Kluge, Gy., Lajtai, A., Dyachenko, P. P., Kuzminov, B. D.*, Atomnaya Energiya 33, 784, 1972.  
 Jo65. *Johansson, S. A. E.*, Nucl. Phys. 64, 147, 1965.  
 Jo70. *John, W., Guy, F. W., Weselowski, J. J.*, Phys. Rev. C2, 1451, 1970.  
 Kl68. *Kluge, Gy., Lajtai, A.*, Phys. Letters, 27B, 65, 1968.  
 Kl69. *Kluge, Gy., Lajtai, A.*, Phys. Letters 30B, 311, 1969.  
 Kl71. *Kluge, Gy.* Phys. Letters (megjelenés alatt) Report KFKI-71—55, 1971.  
 Ko70. *Konshin, V. A., Manero, J.*, Report INDC (IDS)-19, 1970.  
 La64. *Lang, D. W.*, Nucl. Phys. 53, 113, 1964.  
 Le52. *Le Couteur, K. J.*, Proc. Phys. Soc. A65, 718, 1952.  
 Le59. *Le Couteur, K. J., Lang, D. W.*, Nucl. Phys. 13, 32, 1959.  
 Me67. *Meadows, J. W.*, Phys. Rev. 157, 1076, 1967.  
 Mi62. *Milton, J. C. D., Fraser, J. S.*, Can. J. Phys. 40, 1626.  
 Mi65. *Milton, J. C. D., Fraser, J. S.* Proc. Conf. on Phys. and Chem. of Fission, Salzburg, 1965, IAEA, Vienna, 1965. Vol. II. p. 39.  
 Ne52. *Nereson, N.*, Phys. Rev. 85, 600, 1952.  
 Ne56. *Newton, T. D.* Can. J. Phys. 34, 804, 1956.  
 Ne65. *Neiler, J. H., Bell, P. R.* in „Alpha-, beta- and gamma-ray spectroscopy” ed. by K. Siegbahn. North-Holland Publ. Co. Amsterdam, 1965. Vol. I. p. 245.  
 Ne69. *Nefedov, V. N.* Report NIAR-P52, 1969.  
 Nu67. *Nuclear Enterprises (G. B.) Ltd.* Catalogue 1967. p. 23.  
 Sc60. *Schmeling von, H.—H. K.—B.*, Zeitschrift für Physik 160, 520, 1960.  
 Sc65. *Schwarz, S., Strömberg, L. G., Bergström, A.*, Nucl. Phys. 63, 593, 1965.  
 Sc66. *Schmitt, H. W., Neiler, I. H., Walter, F. J.*, Phys. Rev. 141, 1146, 1966.  
 Sm56. *Smith, A. B., Fields, P. R., Friedman, A. M.*, Phys. Rev. 104, 699, 1956.



- Sm57. *Smith, A. B., Fields, P. R., Roberts, J. H.*, Phys. Rev. 108, 411, 1957.  
St65. *Stein, W. E.*, Proc. Conf. on Physics and Chemistry of Fission, Salzburg, 1965; IAEA Vienna, 1965. Vol. I. p. 491.  
Te59. *Terrel, J.*, Phys. Rev. 113, 527, 1959.  
Wa52. *Watt, B. E.* Phys. Rev. 87, 1037, 1952.  
We70. *Werle, H.*, Report INR-4, 70—25, Karlsruhe, 1970.  
Za70. *Zamyatin, Y. S., Kroskin, N. I., Melnikov, A. K., Nefedov, V. H.*, Proc. 2nd Conf. Nuclear Data for Reactors, Helsinki 1970; IAEA Vienna 1970, Vol. II. p. 183.  
Za71. *Zaritsky, S. M., Nikolaev, M. N., Troyanov, M. F.*, Report INDC (CCP)—17/U, IAEA-NDS, 1971.

# ÚJABB EREDMÉNYEK FÉMEK KOHÉZIÓJÁNAK ÉS RÁCSDINAMIKÁJÁNAK ELMÉLETÉBEN\*

SOLT GYÖRGY

MTA KFKI, 1525 Budapest, p.f. 49.

## TARTALOM

1. Bevezetés .....	343
2. A teljes energia adiabatikus közelítésben .....	346
3. Ionrács dinamikája homogén merev háttér esetén .....	350
3.1. Az elektrosztatikus (Madelung) energia .....	350
3.2. Rácsrezgések hipotetikus, nem polarizálható negatív háttér esetén .....	356
4. Egyszerű fémek egyensúlyi tulajdonságai és rácsrezgései .....	361
4.1. A homogén elektronfolyadék .....	361
4.2. Átlagos ion-elektron kölcsönhatás és a fémek sűrűsége .....	365
4.3. Polarizációs energia és dielektromos állandó .....	369
4.4. A fémek kompresszibilitása és rács szerkezete .....	376
4.5. Rugalmas állandók és rezgések .....	384
5. Merre tart a kutatás napjainkban? .....	391

## 1. Bevezetés

A periódusos rendszer elemeinek túlnyomóan nagy többsége fém, mely közönséges nyomáson és hőmérsékleten kristályos halmazállapotú. Az anyag mikroszkopikus, kvantummechanikai elméletének elsődleges feladata, hogy „első elvek” alapján, esetünkben a szabad atom tulajdonságainak ismeretében, választ adjon arra a kérdésre, miért előnyös a szabad, mondjuk, nátrium atomok számára, hogy „feladván” önállóságukat, szabályos térbeli rácsot képezzenek, illetőleg, hogy konkrétan megmagyarázza az adott esetben a kötési energia 0,11 eV/atom értékét és azt, miért éppen tércentrált köbös szerkezet alakul ki.

A fémes kötés kvalitatív értelmezése a homopoláros molekuláris kötés megértésével egy időben, a harmincas évek elején született meg. Eszerint röviden azt mondhatjuk, hogy a fématomoknak a kötésben résztvevő elektronjai „kollektivizálódnak”, az egész kristályt behálózó molekulapályán mozognak és az összes ion vonzó potenciáljának hatásaként egy-egy elektron energiája átlagosan alacsonyabb, mint egyetlen ionhoz kötött, atomi állapotában. Bár a kristályosodáskor ennek eredményeképpen felszabaduló energia annál nagyobbnak tűnik, minél kisebb a létrejövő fém rácsállandója, ez mégis így: a kötésben résztvevő elektronok átlagos kinetikus energiája a sűrűséggel gyorsan növekszik. Végeredményben

\* Érkezett 1975. X. 1.

a megvalósuló rácsállandót és a fém kompresszibilitását a potenciális és kinetikus energia „kompromisszuma” határozza meg.

Bár a fenti kép — néhány lényeges kiegészítés után — jó alapul szolgál a kitűzött feladat: a valódi fémek egyedi kohéziós és rácsdinamikai tulajdonságainak leírásához, mind a kristályszerkezetek értelmezése, mind pedig a rezgési frekvenciák, rugalmas állandók konkrét esetekben történő meghatározása sokáig váratott magára és csak a legutóbbi évtizedben vált lehetségessé. Az utóbbi években egyrészt új elméleti eredmények születtek az elektronfolyadék kutatásában, új számítási módszereket dolgoztak ki. A másik tényező azonban legalább ilyen jelentős: a lassú neutronok szórásával hatalmas tömegű kísérleti anyagot nyertünk, melynek feldolgozásával részletes kép alakult ki a kristályrács atomjainak mozgásáról — más szóval a kötőerők aprólékos *kísérleti* megismerése vált lehetségessé.

Az elmélet fejlődésében az első jelentős lépést Wigner és Seitz, továbbá Fuchs munkái jelentették [1]. A fém belsejében szabadon mozgó elektrongáz tételtek fel, melynek átlagos energiáját a fémben „zérus”-nívóhoz adva, kapjuk a fém teljes energiáját. Az elmélet egyik gyengéje éppen ennek a vonatkoztatási nívónak a meghatározásában rejtett: a feltevés szerint ez a *szabad ion* potenciálterében, a megváltozott határfeltételekkel mozgó elektron energiája. Mivel ez a feltevés csak egyvegyértékű fémekre valószínűsíthető, az alkalmazás lehetősége eleve az alkáli fémekre korlátozódott. A másik alapvető nehézség az, hogy az elméletnek ez a formája nem ad áttekinthető eljárást a *szerkezetfüggő* energia számítására, így nem alkalmas a kialakuló fémes szerkezetek magyarázatára. A két probléma közös eredetű: a Wigner—Seitz-módszerben az elektron-rendszer *sokrészesce* tulajdonságait csak a *szabad* elektrongáz energiájában vesszük tekintetbe, ugyanakkor az ion-elektron kölcsönhatást ad hoc, az atomfizikai kéttest-probléma sémája szerint tárgyaljuk. A későbbiekben gyakran előfordult, hogy a kohéziós energia számításokban egyre bonyolultabb, az *egyelektron*-energiasávok meghatározására alkalmas módszereket alkalmaztak, abban a hitben, hogy a kötési energiának is egyre jobb közelítéséhez jutottak.

Alapvető újítást jelentett Hellmann és Kassatotchkin (1937) munkája [2], akik egy új fogalom, a pszeudopotenciál bevezetésével a teljes energiát általánosan, az elektronfolyadék perturbált energiájaként tudták értelmezni. Bár eredményeik egy része — Bardeen egy későbbi, elvi és gyakorlati szempontból talán kevésbé jelentős dolgozatának folyományaképpen — átment a köztudatba, az elmélet továbbfejlesztésére csak mintegy harminc év késéssel, a pszeudopotenciál fogalom hatvanas évekbeni renaissance-a idején került sor.

A pszeudopotenciált felhasználó, az elektronfolyadék válaszfüggvényein alapuló elmélet [3], [4] elsődlegesen a nem-átmeneti fémek és ezek ötvözeinek leírására alkalmas, ahol tehát a fémes kötést az atomi *s* és *p* pályákról leszakadt elektronok létesítik. Az elmélet átveszi az eredeti hipotézist: első közelítésben a fémionok közötti elektronfolyadék homogén. (A nemesfémek, valamint az átmeneti fém-sorozatok VII-VIII. csoportjának fémjei esetén az atomi jelleget lényegében megőrző d-elektron állapotok külön megfontolást igényelnek.) Az elmélet az ionok *szórási* tulajdonságaira koncentrál, lemond az elektron-hullámfüggvényeknek a mag közelében való meghatározásáról, minthogy a *fémes* sajátságok meghatározásában ugyanis csak az ionok közötti teret kitöltő elektronfolyadéknak van szerepe. A fém energiájában az ionoknak az eredetileg homogén elektronfolyadékot polarizáló hatása perturbációs soronként jelenik meg, melynek egymásután következő



tagjai *térfogati energiát*, két ion között az elektronok által közvetített *pár-kölcsönhatást, háromtest-erőket* stb. képviselnek. A pszeudopotenciált az ötvenes évek végén a fémek és félvezetők elektronsáv-szerkezetének számítására „fedezték fel” újra. Bár a módszer erre is alkalmas, hiszen rendkívül egyszerű (bár nem a legpontosabb) eljárást ad az egyelektron-energiák számítására, forradalmian újat éppen a kohéziós energia elméletében jelentett, mivel itt az említett perturbációs sor lényegében az *egyetlen* általánosan használható elvi módszert szolgáltatja. Ahogyan az elem *rendszámának* ismeretében az atomfizika módszerei elvezetnek az *atom* kémiai sajátságainak (vegyérték, ionizációs energiák, stb.) meghatározására, a *szabad ion szórási tulajdonságait* egy-két paraméter útján magában sűrítő pszeudopotenciálból, mint „bemenő” adatból gyorsan konvergáló sor segítségével megkaphatjuk a *fém* vagy ötvözet rácsállandóját, szublimációs hőjét, kristályszerkezetét, rugalmas tulajdonságait, rácsrezgési frekvenciáit. Ha még figyelembe vesszük, hogy maga a pszeudopotenciál a *szabad ion* tetszőleges pontossággal kiszámítható fizikai jellemzője, a kohéziós energiák, kristályszerkezetek elméleti megismerésének valóban ideális módszerével állunk szemben. Azaz — ennyire jól mégsem állunk. A számítás végeredménye különösen a többvegyértékű fémek esetén általában meglehetősen pontatlannak bizonyul. Ennek oka a molekulafizikus számára persze régóta jól ismert, mégis, a  $10^{23}$  atomot tartalmazó molekulák: a fémek elméleti fizikáját kutatók számára eleinte kellemetlen meglepetés volt. A lényegét Coulson, a híres kémikus könyvéből idézzük: egy molekula kötési energiáját *kiszámítani* olyanféle feladatot jelent, mint a hajóskapitány testsúlyát úgy meghatározni, hogy a hajó merülését mérjük meg kapitánnyal a fedélzetén, majd anélkül. A kohéziós energiát valóban ilyenféle módszerrel számítjuk ki. Például az alumínium *atom* három lazán kötött külső elektronját gondolatban „lehámozzuk”, az ehhez szükséges (ionizációs) energiát kísérleti táblázatokból ismerjük, majd számításainkban „felépítjük” a *fém*es alumíniumot, azaz a háromvegyértékű ionok rácsába „beleöntjük” a kötési elektronokból álló „folyadékot”. Ekkor energia szabadul fel, mely, ha számításunk helyes volt, valamivel nagyobb, mint az ionizációhoz volt szükséges (ezért létezik fémes alumínium). Mind a fém teljes energiája, mind az ionizációhoz szükséges energia azonban sokszorta nagyobb, mint különbségük, az alumínium szublimációs hője. Így ez utóbbit a számításokból aránylag nagy hibával kapjuk. Hasonlóan, a fém rugalmas állandóinak számításakor ionizációs energia/atomtérfogat nagyságrendű mennyiségekből „építkezünk” és az egymást kompenzáló tagok összegéből adódik a legalább tízszerre kisebb, észlelt érték.

Az elmúlt évtized bebizonyította, hogy az elmélet teljesítőképessége — a már említett és később említendő elvi problémák ellenére — óriási. A meglevő tapasztalati tények egyszerű magyarázatán túl — ami például a gallium rácsszerkezetének esetében igazán figyelemre méltó — olyan új *mérési* módszerek születtek, mint pl. a Kohn-anomáliákon keresztül a Fermi-felület tanulmányozása, vagy a fononok csoportsebességének méréséből a magasabb rendű elektron-polarizációs válaszfüggvények szingularitásainak vizsgálata. Az elektron-folyadék magasabb rendű válaszfüggvényeinek szisztematikus, sokrészeske-módszerekkel történő tanulmányozásához egyébként éppen a rácsrezgések, a kötési energia tanulmányozásán keresztül jutottak el, és a *Brovman* és *Kagan* által megjósolt (1972) általános típusú Fermi-felület-anomáliák [3] létezésére már kísérleti bizonyítékok vannak.

Ebben a rövid dolgozatban vázlatosan tekinthetjük csak át az elmélet legújabb fejlődését, annyire, amennyire a bemutatandó új eredmények megértése

feltétlenül igényli. A tárgyalás során nagymértékben felhasználtuk az elmélet kidolgozásában kiemelkedő szerepet vállaló *Brovman* és *Kagan* szovjet kutatók monográfiáját [3], valamint *Heine* és *Weaire* munkáját [4]: a hivatkozások számát egyébként minimálisra igyekeztünk csökkenteni. A merev háttéren rezgő ionrács példája után a homogén elektronfolyadékkal kapcsolatos alapfogalmakat vázoljuk, hogy a valódi fém modelljét felépíthessük. Terjedelmi okok miatt csak érintjük az egyszerű fémekből felépülő *ötvözetek* elméletét. Az átmeneti fémek és ötvözetek tárgyalását sem kíséreljük meg, elsősorban azért, mert a kevés számú általános érvényű elméleti eredmény alapján még nem alkotható átfogó kép erről a területről.

## 2. A teljes energia adiabatikus közelítésben

Tekintsük az  $N$  darab  $Z$  töltésű pozitív ionból és  $NZ$  számú elektronból álló (semleges) rendszer energiáját. Látni fogjuk, hogy az energia, mint az ionok koordinátáinak függvénye,  $T=0\text{K}^\circ$  közelében meghatározza a kristály összes egyensúlyi és dinamikai tulajdonságát. Ha az ionok pontszerű, szerkezet nélküli,  $M$  tömegű objektumok volnának, mindegyik ion egy  $\mathbf{r}_i$  koordinátájú elektronra nézve egy  $-Ze^2/|\mathbf{r}_i|$  potenciálforrást képviselne. Minthogy azonban éppen az *iontörzs* tulajdonságaiban kell keresnünk az (egyébként azonos vegyértékű) fémek *különbözőségének* magyarázatát, tekintetbe kell vennünk, hogy az iontörzsnek az elektronra gyakorolt hatása bonyolultabb a fenti Coulomb-vonzásnál. Vezessük be ezért az ion-elektron kölcsönhatás jelölésére a  $v(r)$  jelölést. Ennek a kölcsönhatásnak a tulajdonságairól később bővebben lesz szó, egyelőre csak annyit jegyezzük meg, hogy az iontól „elégendően” távol mindenesetre Coulomb-szerű, azaz

$$v(r) \approx -Ze^2/r \quad (r \gg R_c), \quad (2.1)$$

ahol az ion-törzs sugár,  $R_c$  a szabad atom (a törzselektronok hullámfüggvényei) alapján meghatározott mennyiség. Az iontörzsekről feltételezzük, hogy lezárt elektronhéjakkal rendelkeznek, így elektroneloszlásuk és potenciáljuk egyaránt gömbszimmetrikus.

A fentiek alapján a rendszer *egy ionra jutó* energiáját így írhatjuk fel:

$$H = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{P}_i^2/2M + \frac{1}{2N} \sum_i \sum_{m \neq i} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_m|} + \frac{1}{N} \sum_i \sum_i v(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_i) + \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{p}_i^2/2m + \frac{1}{2N} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.2)$$

ahol  $\mathbf{P}_i$  és  $\mathbf{p}_i$  az ionok, ill. elektronok impulzusát,  $\mathbf{R}_i$  az iontömegközéppont (atommag) és  $\mathbf{r}_i$  az elektronok koordinátáit jelöli. Az ion-ion kölcsönhatás az ionok gömbszimmetriája miatt a felírt Coulomb-taszítás lesz mindaddig, amíg két ion távolsága nagyobb  $2R_c$ -nél, amit, mint látni fogjuk, a vizsgált fémek esetén mindig feltételezhetünk.



Mindenekelőtt meg kell jegyeznünk, hogy végtelen nagynak képzelt rendszer esetén a fenti felírásban a potenciális energia-tagok divergens kifejezések, ha a rendszer térfogatát minden határon túl növeljük. Így pl.

$$\sum_m \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m|} \sim Z^2 e^2 \int \frac{n_i d\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|},$$

ahol  $n_i = 1/\Omega_0 = N/\Omega$  az ionok sűrűsége. ( $\Omega_0$  az egy ionra átlagosan jutó térfogat,  $\Omega$  a teljes rendszer térfogata.) Az egy ionra jutó potenciális energia persze a valóságban véges, hiszen az  $l$ -dik iontól távolodva, egymást semlegesítő pozitív és negatív töltés-héjak potenciálja adódik össze a  $\mathbf{R}_l$  helyen. A fenti kifejezéseket ezért úgy értjük, hogy a három potenciális energia-tagban az  $m$ ,  $i$ , ill.  $j$ -re vett összegzéseket nem egymástól függetlenül, hanem egymással párhuzamosan kell végezni, semleges, egyre nagyobb térfogatelemek kiválasztásával. (Más szóval a rendszer méreteit,  $N$ -t csak a felírt kifejezések kiszámítása és összeadása után szabad minden határon túl növelni.)

Célszerű az energia kifejezését kissé átalakítani:

$$H = H_{ii} + H_{ie} + H_{ee}, \quad (2.3)$$

ahol a  $H_{ii}$  ion-ion energia a következő alakú:

$$H_{ii} = \frac{1}{N} \sum_l \mathbf{p}_l^2 / 2M + V_{ii}(\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N)$$

$$V_{ii} = \frac{1}{2N} \sum_l \sum_{m \neq l} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m|} - \frac{1}{N} \sum_l Z e^2 \int \frac{n_0 d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{r}|} + \frac{e^2}{2N} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{n_0 n_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.4)$$

Az ionok Coulomb-taszítását leíró potenciális energiához hozzáadtunk egy hipotetikus,  $en_0$  tötéssűrűségű ( $n_0 = Z/\Omega_0$ ) *homogén, mozdulatlan* negatív háttérrel való kölcsönhatás energiáját, valamint ennek a háttérnek a sajátenergiáját. A  $V_{ii}$  potenciális energia ezzel egy semleges rendszer (véges) energiája lett, éppúgy, mint a teljes (ion+elektron) rendszer, azonban a (2.4) által felírt rendszer jóval egyszerűbb, mivel kizárólag a mozdulatlan negatív háttéren mozgó ionok  $\mathbf{R}_l$  koordinátáitól függ.

Hasonlóan az elektronokat is egy mozdulatlan, semlegesítő *pozitív* háttérre helyezve

$$H_{ee} = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{p}_i^2 / 2m + \frac{1}{2N} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \frac{1}{N} \sum_i e^2 \int \frac{n_0 d\mathbf{R}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} +$$

$$+ \frac{e^2}{2N} \int n_0 d\mathbf{R} \int n_0 d\mathbf{R}' \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} \quad (2.5)$$

és végül az eddig hozzáadott tagok összegének levonásával az ion-elektron kölcsönhatás így módosul:

$$H_{ie} = \frac{1}{N} \sum_l \sum_i v(\mathbf{R}_l - \mathbf{r}_i) + \frac{1}{N} \sum_l Z e^2 \int \frac{n_0 d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{r}|}. \quad (2.6)$$



Az összegezések és integrálások formális divergenciáit illetően a (2.2)-vel kapcsolatban tett megjegyzés itt is érvényes: (2.3) mindhárom tagja értelmes kifejezés, ha a rendszer méreteit csak az összegezések (integrálások) elvégzése után növeljük minden határon túl.

A fenti energiakifejezések kvantummechanikai számításaink alapjául fognak szolgálni, ezért a szereplő részecskék — ionok és elektronok — impulzusa és koordinátái operátoroknak tekintendők. A rendszer teljes energiája az

$$E = (\psi | H_{ii} + H_{ie} + H_{ee} | \psi) \quad (2.7)$$

menyiség, ahol  $\psi$  az ion-elektron rendszer hullámfüggvénye.

A hullámfüggvény pontos meghatározásáról — sokrészecske rendszerről lévén szó — persze szó sem lehet, *közelítések*re vagyunk utalva.

Az első lépésben az *adiabatikus közelítés* által nyújtott egyszerűsítést használjuk ki. A nagyobb tömegű ionok mozgása általában lassúbb lesz, mint az elektronoké (más szóval az elektronok *átlagos* sebessége a fémekben sokszorosa az ionok mozgásával kapcsolatos hangsebességnek), ezért első közelítésben  $H_{ee}$  és  $H_{ie}$ -ben rögzítettnek tekinthetjük az  $\mathbf{R}_i$  ionkoordinátákat, megkereshetjük az elektronok *legalacsonyabb alapállapot*i energiáját és hullámfüggvényét, mely egy meghatározott  $\mathbf{R} \equiv \{\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N\}$  ionkonfigurációhoz tartozik:

$$\hat{H}_{el} \psi_{el}^{(\mathbf{R})} \equiv \{\hat{H}_{ie}(\mathbf{R}_j, \hat{\mathbf{r}}_i) + \hat{H}_{ee}(\hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{r}}_i)\} \psi_{el}^{(\mathbf{R})} = E_{el}^{(\mathbf{R})} \psi_{el}^{(\mathbf{R})} \quad (2.8a)$$

és a rendszer hullámfüggvényére a

$$\psi = \psi_{el}^{(\mathbf{R})}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_{N-Z}) \cdot \Phi(\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N) \quad (2.8b)$$

feltevést téve, a *teljes* energiát közelítőleg annak a Schrödinger-egyenletnek a megoldása adja, melyben a direkt Coulomb-kölcsönhatás mellett az elektronenergia, pontosabban az *elektron-alapállapot*i energia, mint *közvetett ion-ion kölcsönhatási* potenciál szerepel potenciális energiaként:

$$\left\{ \frac{1}{N} \sum \mathbf{p}_i^2 / 2M + V_{ii}(\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N) + E_{el}(\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N) \right\} \Phi = E \Phi. \quad (2.8c)$$

Az adiabaticus közelítés érvényessége fémek esetén részben az elektrontömeg-iontömeg arány kicsinységén, részben az elektronfolyadék statisztikus mechanikai sajátosságain múlik [3]. Keressük tehát a (2.8c) egyenlet legkisebb  $E$ -hez tartozó megoldását: ez az energia és a hozzá tartozó hullámfüggvény jellemzi az *abszolút zérus* hőmérséklet közelében a kristály állapotát. A (2.8) egyenletnek a *természetben megvalósuló* megoldásairól az első röntgendiffrakciós vizsgálatok óta tudjuk, hogy szabályos térbeli rács, mint egyensúlyi helyzet körül kis rezgéseket végző ion-rácsot írnak le. Jelölje  $\{\mathbf{R}_i^0\}$  annak a geometriai rácsnak a koordinátáit, amely olyan tulajdonságú, hogy  $\{\mathbf{R}_i\} = \{\mathbf{R}_i^0\}$  esetén a (2.8c)-beni potenciális energia lokális minimumot ér el:

$$\left[ \frac{\partial [V_{ii} + E_{el}]}{\partial \mathbf{R}_i} \right]_{(\mathbf{R}_i) = (\mathbf{R}_i^0)} = 0. \quad (2.9a)$$

Több ilyen tulajdonságú rácsszerkezet létezhet. A klasszikus fizika szerint abszolút zérus fokon az a szerkezet valósulna meg, melynél a (2.9a) minimum egyben  $\{V_{ii} +$

$+E_{el}$ } abszolút minimuma. Ez a kép azonban — még  $T=0$  közelében is — módosul, a zérusponti rezgések miatt. Írjuk mindenekelőtt a koordinátákat ilyen alakban:

$$\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_l^0 + \delta \mathbf{R}_l, \quad (2.10)$$

ekkor (2.8c) alapján másodrendben kapjuk:

$$\left\{ \tilde{E}_0 + \frac{1}{N} \sum_l \mathbf{P}_l^2 / 2M + \sum_l \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{l'} \sum_{\alpha'=x,y,z} K_{l\alpha, l'\alpha'} \delta R_{l,\alpha} \delta R_{l',\alpha'} \right\} \Phi = E\Phi, \quad (2.11a)$$

ahol

$$\tilde{E}_0 = V_{ii}(\mathbf{R}_1^0 \dots \mathbf{R}_N^0) + E_{el}(\mathbf{R}_1^0 \dots \mathbf{R}_N^0) \quad (2.11b)$$

és

$$K_{l\alpha, l'\alpha'} = \left[ \frac{\partial^2 \{V_{ii} + E_{el}\}}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{l'\alpha'}} \right]_{\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_l^0} \quad (2.11c)$$

Minthogy a  $K$  „erőállandó-tenzor” definíció szerint szimmetrikus, a (2.11a) Hamilton-függvény a  $(\delta \mathbf{R}_l, \mathbf{P}_l)$  változók alkalmas lineáris kombinációinak bevezetésével harmonikus oszcillátor-operátorok összegére „diagonizálható” [5]:

$$\left\{ \tilde{E}_0 + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{3N} P_s^2 + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{3N} \omega_s^2 Q_s^2 \right\} \Phi = E\Phi,$$

ahol a  $Q_s$  és  $P_s$  „normál-koordináták” és impulzusok  $\delta \mathbf{R}_l$  és  $\mathbf{P}_l$  lineáris kombinációi, pl.

$$Q_s = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} t_{s,l\alpha} \delta R_{l,\alpha}.$$

A  $T=0^\circ$ -on megvalósuló legalacsonyabb energiájú állapot az oszcillátor-rendszer alapállapota, ekkor a kristály energiája

$$E_0 = \tilde{E}_0 + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{3N} \hbar \omega_s = V_{ii}(\mathbf{R}_1^0 \dots \mathbf{R}_N^0) + E_{el}(\mathbf{R}_1^0 \dots \mathbf{R}_N^0) + \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{3N} \hbar \omega_s, \quad (2.12)$$

tehát a „klasszikus” egyensúlyi energiához az oszcillátorok „zérusponti” energiája is hozzáadódik. Bár a zérusponti energia értéke általában nem jelentős a kötési energiában, a frekvenciák szerkezettől, térfogattól való függése mindenképpen arra vezet, hogy a

$$\left[ \frac{\partial E_0}{\partial \mathbf{R}_l} \right]_{\{\mathbf{R}_l\} = \{\bar{\mathbf{R}}_l\}} = 0 \quad (2.9b)$$

feltétellel [6] meghatározott  $\{\bar{\mathbf{R}}_l^0\}$  valódi egyensúlyi kristályrács (amelyet tehát diffrakciós módszerrel észlelni lehet  $T=0^\circ$  közelében) többé-kevésbé eltér  $\{\mathbf{R}_l^0\}$ -tól. Egy-egy konkrét rácsszerkezet esetén ez a különbség a rácsállandók értékében nem jelentős: mint „anharmonikus effektust” a továbbiakban elhanyagoljuk. Érdekes és jelentősebb hatása lehet a zérusponti rezgéseknek az, hogy két igen közeli  $\tilde{E}_0$  energiára vezető szerkezet közül a klasszikusan abszolút minimumnak adódó szerkezet helyett — (2.9b) alapján — a másik szerkezet bizonyulhat előnyösebbnek. (Tetszőleges hőmérsékleten olyan szerkezet valósul meg, mely  $E_0$  helyett a rezgések entrópiáját is tartalmazó szabadenergiát teszi minimálissá.) Ami a normál-koordináták és

frekvenciák konkrét meghatározását illeti, ez a kristályrács eltolási szimmetriájának felhasználásával válik lehetségessé. Az  $\{\mathbf{R}_m^0\}$  geometriai rács pontjainak koordinátái így írhatók:

$$\mathbf{R}_m^0 = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 + \mathbf{c}_\mu \quad (\mu = 1, 2, \dots, v), \quad (2.13)$$

ahol  $\tilde{m} \equiv (m_1, m_2, m_3)$  komponensei egész számok,  $\mathbf{a}_i$  jelöli az elemi cella élvektorait (az elemi eltolás-vektorokat) és  $\mathbf{c}_\mu$  az  $N_0$  darab elemi cellában levő  $v$  számú rács-helyet jelöli ki. (Az összes rács-helyek száma  $N = N_0 \cdot v$ .) Bravais rács esetén  $v=1$ . Az eltolási szimmetria arra vezet, hogy a megfelelő lineáris transzformáció az új  $Q$  változókra (minden ion tömegét egyenlőnek véve)

$$\delta R_{\tilde{m}, \mu, \alpha} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \frac{1}{\sqrt{M}} f_{\mu\alpha}(\mathbf{q}, \lambda) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m^0} \cdot Q(\mathbf{q}, \lambda)$$

alakú, ahol az  $\mathbf{f}(\mathbf{q}, \lambda)$  vektorok a

$$D(\mathbf{q})_{\mu\alpha, \mu' \alpha'} = \frac{1}{M} \sum_{\tilde{m}} K_{\tilde{m}, \mu, \alpha; \tilde{m}', \mu' \alpha'} \cdot e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_m^0 - \mathbf{R}_{m'}^0)} \quad (2.14)$$

$(3v \times 3v)$  dimenziós dinamikai tenzor sajátvektorai,  $\omega_{\mathbf{q}\lambda}^2$  sajátértékkel:

$$D\mathbf{f}(\mathbf{q}, \lambda) = \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 \mathbf{f}(\mathbf{q}, \lambda). \quad (2.15)$$

A (2.14) Fourier-típusú transzformációt azon  $N_0$  számú  $\mathbf{q}$  értékre kell elvégezni, amelyek az  $\mathbf{a}_i$  vektorok segítségével képezett

$$\mathbf{b}_i = 2\pi(\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k) / (\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3) \quad (2.16)$$

ún. reciprokrács alap-vektorból felépülő geometriai rács egy elemi celláját töltik meg,  $\Omega/(2\pi)^3$  sűrűséggel [5] ( $i, j, k$  az 1,2,3 számok ciklikus permutációja).

A kristály stabilitásának általános feltétele természetesen az, hogy a feltételezett szerkezet esetén minden sajátértékre pozitív szám adódjon. A (2.14) definícióból és (2.11) ből világos, hogy a dinamikai tenzor additív:

$$D(\mathbf{q}) = D_i(\mathbf{q}) + D_{el}(\mathbf{q}), \quad (2.17)$$

ahol  $D_i$  a  $V_{ii}$  Coulomb-energiából,  $D_{el}$  pedig az  $E_{el}$  elektronenergiából képezett erőállandókkal kapcsolatos. Először az  $E_{el}$  elhagyásával adódó Coulomb-rács problémájával foglalkozunk.

### 3. Ionrács dinamikája homogén merev háttér esetén

#### 3.1. Az elektrosztatikus (Madelung) energia

Ebben a pontban a (2.4) által definiált  $V_{ii}$  energia meghatározásával foglalkozunk, melyet a jobboldal két utolsó tagjának összevonásával így írhatunk:

$$V_{ii} = \frac{1}{2N} \sum_i \sum_{m \neq i} \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_m|} - \frac{1}{2} \frac{Ze^2 n_0}{N} \sum_i \int \frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}|}. \quad (3.1)$$



Ezt az  $U(\mathbf{R})$  rácspotenciál alábbi definíciója segítségével

$$U(\mathbf{R}) = \sum_m \frac{Ze}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|} - en_0 \int \frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \quad (3.2a)$$

átírhatjuk a

$$V_{ii} = \frac{1}{2N} \sum_i \lim_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_i} \{ZeU(\mathbf{R}) - Z^2 e^2 / |\mathbf{R} - \mathbf{R}_i|\} \quad (3.2b)$$

alakba. A felírásból világos  $U$  jelentése: a tér egy  $\mathbf{R}$  pontjában a rácspontokon ülő ionok és a semlegesítő háttér által keltett elektrosztatikus potenciálról van szó.  $V_{ii}$ -ben persze nem szerepel egy ionnak önmagával való kölcsönhatása, éppen ezt vonjuk le a (3.2b) kifejezésben.

A fenti kifejezések — a konvergenciáról mondottak figyelembevételével — szabályos rács esetén kiszámíthatók a definíciók alapján, közvetlenül is, de egyszerű és jobban kezelhető (differentiálható) képletekhez juthatunk az alábbi, lényegében *Ewald* által kidolgozott módszer segítségével.

Írjuk először is  $U(\mathbf{R})$ -t ilyen alakban:

$$U(\mathbf{R}) = \sum_m \left( \frac{Ze}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|} - U_\eta(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|) + \sum_m (U_\eta(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|) - \int \frac{en_0 d\mathbf{r}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right), \quad (3.3)$$

ahol  $U_\eta(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|)$  egy ugyancsak az  $\mathbf{R}_m$  pontban centrált,  $Ze$  össztöltésű, Gauss-függvénnyel leírt  $q_\eta$  gömbszimmetrikus töltéeloszlás potenciálja. Az  $\eta$  paraméter a töltéeloszlás kiterjedését szabja meg:

$$q_\eta(r) = Ze \frac{\eta^3}{\pi^{3/2}} e^{-\eta^2 r^2}. \quad (3.4)$$

Az újonnan bevezetett töltéeloszlás és potenciálja segítségével (3.3) mindkét tagja egyszerű, zárt alakra hozható,  $U_\eta$  alábbi két előállításával:

$$U_\eta(r) = \begin{cases} Ze \left[ \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \operatorname{erfc}(\eta r) \right] & (3.5a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} Ze \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2} e^{-k^2/4\eta^2} \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, & (3.5b) \end{cases}$$

ahol  $\operatorname{erfc}$  az ismert hiba-integrál függvény:

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-\xi^2} d\xi.$$

Megjegyezzük, hogy ez a függvény az argumentum kis és nagy értékei esetén a következő viselkedést mutatja:

$$\operatorname{erfc}(x) \approx \begin{cases} 1 - 2/\sqrt{\pi} x + \frac{2}{3\sqrt{\pi}} x^3 - \dots & (x \ll 1), \\ e^{-x^2}/\sqrt{\pi} / x (1 - 1/2x^2 + \dots) & (x \gg 1). \end{cases} \quad (3.6)$$

A (3.5b) felírás voltaképpen  $U_\eta(r)$  Fourier-integrálja, melyet egyszerűen úgy kaphatunk, hogy a Poisson-egyenlet

$$\Delta U_\eta = -4\pi\varrho_\eta$$

mindkét oldalát Fourier-transzformáljuk és felhasználjuk, hogy a  $\varrho_\eta$  Gauss-eloszlás transzformáltja is Gauss-függvény lesz.\*

A (3.5a) alakhoz úgy juthatunk, hogy alkalmazzuk az elektrosztatikából jól ismert eredményt: a gömbszimmetrikus töltéeloszlás potenciálja a középponttól  $r$  távolságban

$$U_\eta(r) = \frac{1}{r} \int_0^r \varrho_\eta(\xi) 4\pi\xi^2 d\xi + \int_r^\infty \frac{\varrho_\eta(\xi)}{\xi} \cdot 4\pi\xi^2 d\xi \quad (3.7)$$

alakú, mely  $\frac{1}{Ze} \cdot \varrho_\eta$  normáltságát felhasználva a

$$\begin{aligned} U_\eta(r) &= \frac{Ze}{r} - \frac{1}{r} \int_r^\infty 4\pi\xi^2 \varrho_\eta(\xi) d\xi + \int_r^\infty 4\pi\xi \varrho_\eta(\xi) d\xi = \\ &= \frac{Ze}{r} + 4\pi \int_r^\infty \xi(1-\xi/r) \varrho_\eta(\xi) d\xi \end{aligned}$$

alakra hozható. Ide  $\varrho_\eta$  konkrét alakját beírva, parciális integrálással a (3.5a) képlethez jutunk.

Írjuk most be a potenciál (3.3) képletének első tagjában  $U_\eta$  (3.5a) előállítását, továbbá alakítsuk át egy kissé a második tagot is:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{R}) &= \sum_m \frac{Ze}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_m|} \operatorname{erfc}(|\mathbf{R}-\mathbf{R}_m|\eta) + \left\{ \sum_m U_\eta(\mathbf{R}-\mathbf{R}_m) - \int U_\eta(|\mathbf{R}-\mathbf{r}|) \frac{d\mathbf{r}}{\Omega_0} \right\} \\ &+ \left\{ \int \left[ \frac{U_\eta(|\mathbf{R}-\mathbf{r}|)}{Ze} - \frac{1}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} \right] \cdot e n_0 d\mathbf{r} \right\}. \quad (3.8) \end{aligned}$$

Az első összeg az argumentum nagy értékeire gyorsan konvergáló kifejezés (ld. (3.6)). A második tagban levontuk, illetve hozzáadtuk az  $U_\eta$  potenciál átlagos értékét. Ez az „átlagérték” (ami önmagában divergens volna, mint az  $U_\eta$ -k rácspontokra vett összege is, melyből levonjuk), egyébként éppen az  $U_\eta$  Fourier-integráljában szereplő  $k=0$ -dik Fourier-együttható, ezért érdemes a (3.8) képlet második tagjába most a (3.5b) alakot helyettesíteni:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{R}) &= \sum_m \frac{Ze}{|\mathbf{R}-\mathbf{R}_m|} \operatorname{erfc}(|\mathbf{R}-\mathbf{R}_m|\eta) + \frac{4\pi Ze}{N\Omega_0} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_m \frac{1}{k^2} e^{-k^2/4\eta^2} \cdot e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{R}_m)} - \\ &- Ze\pi/\Omega_0\eta^2. \quad (3.9) \end{aligned}$$

\* A Fourier-integrált a kristályfizikában szokásos periodikus határfeltételek mellett sor alakjában írhatjuk:  $\sum_{\mathbf{k}} \leftrightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}$  ekvivalens műveletek.

Itt egyrészt feltüntettük, hogy a 0-dik Fourier-komponens hiányzik, másrészt a (3.8) kifejezés harmadik tagját (3.5a) beírásával közvetlenül integráltuk, ami a kifejezés utolsó tagjára vezet. Bevezetve ezután az ionok struktúra-faktorát,

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_m e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_m} \quad (3.10)$$

a következő eredményt nyerjük:

$$U(\mathbf{R}) = \sum_m \frac{Ze}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|} \operatorname{erfc}(|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|\eta) + \frac{4\pi Ze}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} S(\mathbf{k}) \frac{1}{k^2} e^{-k^2/4\eta^2} \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} - \frac{Ze\pi}{\Omega_0\eta^2}. \quad (3.11)$$

Bár nyilvánvaló, hogy a fenti kifejezés nem függ  $\eta$ -tól, azaz a segéd-töltéseloszlás kiterjedésétől, hiszen az  $U_\eta$  potenciál hozzáadásával és egyidejű levonásával kaptuk, a képlet *formálisan* érdekes tulajdonsága az egyes tagok explicit  $\eta$ -függése, mellyel a szereplő két sor konvergenciájának gyorsaságát szabályozhatjuk. (Nagy  $\eta$  érték-nél a direkt rács vektoraira, kis  $\eta$  mellett a  $\mathbf{k}$ -ra vett összeg konvergál gyorsan.) A fenti átalakítás eredményeként  $U(\mathbf{R})$  deriváltjai is könnyen kiszámíthatók, a második tagban a deriválás a  $\mathbf{k}$ -ra vett összeg (integrálás) előtt elvégezhető. E tagban a  $-\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \left( \frac{1}{k^2} \right)$  tag divergenciája éppen kompenzálja az ezen tag le nem vonása

esetén fellépő  $\sum_m \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_m|}$  szingularitást.)

Az  $\eta \rightarrow \infty$  határetrékben a  $\mathbf{k}$  szerinti integrál egyébként  $U(\mathbf{R})$  Fourier-integrál előállításába megy át, amelyet (3.2a)-ból közvetlenül nyerhetünk; ennek analitikus tulajdonságai azonban nem kielégítőek.

Ezután  $V_{ii}$ -re könnyen kapjuk az eredményt, ha felhasználjuk, hogy kis  $r$  értékekre

$$\frac{1}{r} \operatorname{erfc}(\eta r) \sim \frac{1}{r} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \eta + \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \eta^3 r^2, \quad (3.12)$$

tehát

$$V_{ii} = \frac{Z^2 e^2}{2} \left\{ \frac{1}{N} \sum_l \sum_{m \neq l} \frac{1}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m|} \operatorname{erfc}(|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m|\eta) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \eta + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} |S(\mathbf{k})|^2 e^{-k^2/4\eta^2} \cdot \frac{1}{k^2} - \frac{\pi}{\Omega_0\eta^2} \right\}. \quad (3.13)$$

Ez a képlet adja tehát az elektrosztatikus energiát az ionok teljesen általános térbeli eloszlása esetén. Ezt az energiát persze csak akkor tudjuk — végtelen sok ion jelenléte esetén — valóban kiszámítani, ha az ionok térbeli sűrűsége:

$$\varrho(\mathbf{R}) = \sum_m \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_m),$$

illetve ennek Fourier-transzformáltja:

$$\varrho(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega} \int \varrho(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{R} = \frac{1}{\Omega_0} S(\mathbf{k}) \quad (3.14)$$



nem végtelen sok, hanem csak néhány paraméter egyszerű függvénye. Amikor például az ionok az eltolással szemben szimmetrikus, szabályos egyensúlyi rács pontjain foglalnak helyet, azt kapjuk, hogy [5]  $|S(\mathbf{k})|^2$  csak bizonyos  $\mathbf{k}$  értékeknél nem 0:

$$|S(\mathbf{k})|^2 = \begin{cases} \left| \frac{1}{v} \sum_{\mu=1,2,\dots,v} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_\mu} \right|^2 = |s(\mathbf{G})|^2 & (\mathbf{k} = \mathbf{G}) \\ 0 & \mathbf{k} \neq \mathbf{G}, \end{cases} \quad (3.15)$$

ahol  $\mathbf{G}$  a  $\mathbf{b}_i$  vektorokból felépülő ún. reciprokrács tetszőleges vektora:

$$\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 \quad (h_i \text{ egész}). \quad (3.16)$$

Az  $s(\mathbf{G})$  mennyiség az elemi cella formafaktora, értéke egyatomos kristálynál természetesen 1. A szabályos kristályrács feltételezése egyrészt feleslegessé teszi az  $l$ -re való összegzést (3.13) első tagjában (lévén az  $m$ -re való összeg eredménye minden  $l$ -re azonos), másrészt csak néhány diszkrét  $\mathbf{k}$  értéket enged meg a második tagban:

$$V_{ii}^{(0)} = \frac{Z^2 e^2}{2} \left\{ \sum_{m \neq l} \frac{1}{|\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_m^0|} \operatorname{erfc} |\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_m^0| \eta - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \eta + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} |s(\mathbf{G})|^2 e^{-G^2/4\eta^2} \cdot \frac{1}{|\mathbf{G}|^2} - \frac{\pi}{\Omega_0 \eta^2} \right\}. \quad (3.18)$$

A fenti képlet, mely tehát a *szabályos* kristályrács elektrosztatikus energiája, csupán a rács *alapvektorait* (illetve az ezekből képzett reciprokrács-alapvektorokat) tartalmazza argumentumaként. Ez a képlet  $U(\mathbf{R})$  Fourier-sor előállításából\* az ún.  $\mathcal{G}$ -transzformáció felhasználásával egyszerűbben is levezethető [6], a továbbiakban azonban szükségünk lesz az általánosabb (3.13) alakra is, amelyből az energia  $\mathbf{R}_l$  szerinti deriváltjai is kiszámíthatók. Egyelőre a szabályos rács eseténél maradva nézzük, hogyan használható (3.18), például lapcentrált köbös rács elektrosztatikus energiájának meghatározására. Ekkor  $s(\mathbf{G})=1$ ,  $\eta$  megválasztásánál pedig a következőképpen járhatunk el.

Próbáljuk mindkét szereplő sor összegét minimálisra csökkenteni. Mithogy  $\operatorname{erfc}(x)$  aszimptotikusan egy  $e^{-x^2}$  faktort tartalmaz, legyen ez a faktor éppen akkora, mint a reciprokrács vektorokra vonatkozó sor első tagjának exponenciális szorzója, azaz

$$R_{\min}^2 \eta^2 = G_{\min}^2 / 4\eta^2,$$

ahol  $R_{\min}$  jelöli két legközelebbi szomszéd távolságát a rácsban,  $G_{\min}$  ugyanez a reciprokrácsban. (Hangsúlyozzuk, hogy  $\eta$  megválasztásától a végeredmény *egyáltalában* nem függ, így az optimális  $\eta$  értékének becslésénél nyugodtan használhatunk közelítő aszimptotikus alakot.) Mivel az „ $a$ ” rácsállandójú lapcentrált rácsban  $R_{\min}^2 = a^2/2$  és  $G_{\min}^2 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \cdot 3$  (a reciprokrács tércentrált,  $4\pi/a$  periódussal) — nyerjük

$$\eta^4 = 6\pi^2/a^4, \quad (3.19)$$

\* Az egyensúlyi periodikus rácsban természetesen  $U(\mathbf{R})$  periodikus függvény, (3.11)-ből  $\eta \rightarrow \infty$  után  $\mathbf{k}=\mathbf{G}$  előírással kapjuk Fourier-sorát. Bár  $U(\mathbf{R})$  értéke ebből kiszámítható, a sor nem egyenletesen konvergens, tagonként nem deriválható.

azaz

$$V_{ii}^{(0)} = \frac{Z^2 e^2}{2a} \left\{ -\frac{2}{\sqrt{\pi}} (6\pi^2)^{1/4} - \frac{\pi}{a^2/4} \left[ \frac{a^2}{(6\pi^2)^{1/2}} \right] + \Sigma_1 + \Sigma_2 \right\}, \quad (3.20)$$

ahol felhasználtuk, hogy egy ionra  $a^3/4$  térfogat jut, és definiáltuk az alábbi dimenzió nélküli összegeket:

$$\Sigma_1 = \sum_{m \neq i} \frac{a}{|\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_m^0|} \operatorname{erfc} \left( \frac{|\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_m^0| (6\pi^2)^{1/4}}{a} \right)$$

$$\Sigma_2 = 4\pi \sum_{\mathbf{G}} \frac{4}{a^2 |\mathbf{G}|^2} e^{-[|\mathbf{G}|^2 a^2/4 / (6\pi^2)^{1/2}]}$$

Mivel  $\Sigma_1$  és  $\Sigma_2$  értéke jóval kisebb a két másik tag összegénél, meglehetősen jó alulról vett becslést kapunk az összegek elhagyásával:

$$V_{ii}^{(0)} \approx -\frac{Z^2 e^2}{a} \left( \sqrt[4]{6} + \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \approx -\frac{Z^2 e^2}{2} \cdot \frac{1 \cdot 86}{R_a}, \quad (3.21)$$

ahol az egy ionra jutó ún. *atomi rádiuszt*,  $R_a$ -t a következőképpen definiáltuk:

$$\frac{4\pi}{3} R_a^3 = \Omega_0 \equiv \text{egy ionra jutó térfogat.}$$

Mint (3.18) mutatja, a  $Z^2 e^2 / 2R_a$  faktor leválasztásával minden szerkezetre definiálható az „ $M$  Madelung állandó” a következőképpen:

$$V_{ii}^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2} \cdot \frac{M}{R_a}. \quad (3.22)$$

A (3.21) közelítésen túlmenve, az eddig elhanyagolt összegek értékét a gyors konvergencia eredményeképpen könnyen, nagy pontossággal kiszámíthatjuk; az eredményt néhány egyszerűbb rácsszerkezet esetén az 1. táblázat mutatja.

1. TÁBLÁZAT

Szerkezet	Egyszerű köbös	Lapcentr. köbös (tck)	Tércentr. köbös (tck)	Hexagonális szoros ill. $c/a = \sqrt{8/3}$ (hsz p)	Fehér-ón struktúra $c/a = 0,543$	Egyszerű hexagonális
M	1,76012	1,79175	1,79186	1,79168	1,7733	1,77464

Könnyű egyébként megérteni, miért van  $M$  értéke általában közel 1,80-hoz. Ne feledjük, hogy  $V_{ii}$ , amint ezt a (2.4) előállítás expliciten mutatja, egy *semleges* ion + +háttér rendszer energiája és ha egy szabályos, ismétlődő elemekből felépült kristályról van szó, az egész rendszer egyforma, semleges poliéder-cellákra bontható. Ha most egy-egy ilyen cellát, atomi poliédert egyszerűen gömbnek tekintünk (ami ugyan topológiai képtelenség, de ezzel nem törődünk), ezek a gömbök elektrosztatikusan egymásra semmilyen hatást sem gyakorolnak és így  $V_{ii}$  kifejezésében az

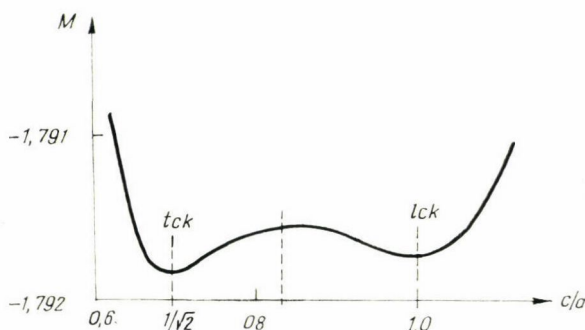
integrálásokat elég *egyetlen* gömbre elvégezni:

$$V_{ii} \sim -Ze^2 \int \frac{n_0 d\mathbf{r}}{r} + \frac{e^2}{2} n_0^2 \int \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

A második integrált (3.7) felhasználásával kiszámítva, az eredmény:

$$V_{ii} \sim -\frac{Z^2 e^2}{2R_a} \cdot 1,80. \quad (3.23)$$

A Madelung állandó tehát általában közel lesz ehhez a „gömbi” értékhez, viszont éppen az 1,80-tól való eltérések, illetve ezek különbsége játszik szerepet abban, hogy mikor milyen rácsszerkezet alakul ki. Az elektrosztatikus energia a „szabályos” szerkezetek esetén minimális.



1. ábra. Lapcentrált tetragonális rács Madelung-állandója az elemi cella alakjának függvényében [4].  
 $c/a=1$  a lapcentrált köbös,  $c/a=1/\sqrt{2}$  a tércentrált köbös szerkezetnek felel meg.

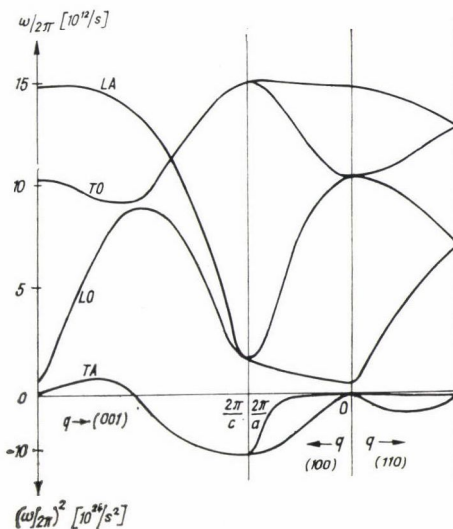
Az 1. ábrán például a tetragonális lapcentrált rács esetén számított  $M$  értékek láthatók:  $c/a=1$  éppen a lapcentrált köbös,  $c/a=0,71$  éppen a tércentrált köbös szerkezet. Mindkét esetben lokális minimumot találunk. A valódi rácsszerkezetet a szabályos (köbös, ill. hexagonális szoros illeszkedésű) szerkezeteket „kedvelő”, itt kiszámolt Madelung energiának és az elektronok polarizációs energiájának a „versengése” dönti el (ld. (2.9)); végeredményben az elektrosztatikusan „abszolút legjobb” tércentrált köbös szerkezet helyett a fémek legtöbbször más rendszerben kristályosodik.

### 3.2. Rácsrezgések hipotetikus, nem-polarizálható negatív háttér esetén

Vizsgáljuk meg, milyen stabilitással és általában milyen dinamikai tulajdonságokkal rendelkezik a (3.1), azaz (3.13) potenciális energiával jellemzett ionrács, amely tehát egy hipotetikus, homogénnek rögzített negatív háttéren mozog. Minthogy — az energiához hasonlóan — a rezgési frekvenciákat szolgáltató dinamikai tenzor is két tag összegére bomlik, melyek közül egyik éppen a fenti hipotetikus rendszerre vonatkozik (2.17), ennek a rendszernek a vizsgálata, elvi érdekességen túl, elkerülhetetlen lépés is a *reális* fém dinamikájának leírásában.



Az adiabatikus közelítés alapképletei, (2.8)–(2.9) alapján láttuk, hogy a fém egyensúlyát az elektrosztatikus energia és az elektron-alapállapot energiájának minimuma jelöli ki. Tekintve, hogy az elektrosztatikus potenciál az atomi térfogat monoton csökkenő függvénye, az ionrács rögzített merev háttérrel csak akkor lehet stabilis, ha *nemcsak* a háttér homogenitása, de *sűrűsége* is egyszersmindkorra adott. Arra is el lehetünk képzelni, hogy még ilyen rögzített sűrűség esetén sem feltétlenül kapunk stabil rácsot, amennyiben a feltételezett rácsszerkezet nem a legegyszerűbbek közül való, hiszen láttuk, hogy az elektrosztatikus energia szempontjából a legszimmetrikusabb szerkezetek előnyösebbek. Az instabilitás úgy jelentkezik, hogy a dinamikai matrixnak negatív sajátértékei (képzetes frekvenciák!) lépnek fel. Például a fehér ón rácsa, vagy a hexagonális rács az ideálistól erősen eltérő  $c/a$  arány esetén, *csak* ion-ion Coulomb potenciálok jelenléte mellett, még rögzített sűrűségnél is spontán összehozomlanának, mint ezt a 2. ábrán látható diagramok mutatják [3].



(Érdekes tény [3], hogy a Madelung-energia szempontjából ideális  $c/a$  arány az ónszerkezetnél 0,545, egészen közel az észlelt 0,543 értékhez, tehát a  $c/a$ -t változtató *homogén deformációra a rács stabil lehetne.*)

Mivel a dinamikai matrix felírása már kétatomos rács (hexagonális szoros illeszkedés, fehér-ón szerkezet stb.) esetén is eléggé sok helyet igényel, a lényeg illusztrálása végett csupán egyatomos rácsra szorítkozunk. Az első deriváltra

2. ábra. Ionrács rezgési frekvenciái fehér ón szerkezet esetén [3]. Az LA „longitudinális akusztikus”, ág  $q=0$ -nál a plazmafrekvenciához tart: nincs longitudinális hang. A TA transzverzális akusztikus frekvenciák a hullámhosszak széles tartományában képzetesnek adódnak, a rács tehát instabil.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(N \cdot V_{ii})}{\partial R_{l' \alpha'}} &= -Z^2 e^2 \left\{ \sum_{l \neq l'} \left[ \frac{\varphi_{\eta}'(r) \cdot r_{\alpha'}}{r} \right]_{r=R_l-R_{l'}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{k \neq 0} i k_{\alpha'} e^{ik(R_{l'}-R_l)} \cdot e^{-k^2/4\eta^2} \cdot \frac{1}{k^2} \right\}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

ahol

$$\varphi_{\eta}(r) = \frac{1}{r} \operatorname{erfc}(\eta r).$$

Bár ez a mennyiség inverziószimmetrikus, (azaz valamennyi Bravais rácsra eltűnik), a rendszer homogén térfogatváltozásra nem stabilis, az ilyen deformációt külön feltevésként kell kizárnunk ebben a fejezetben. A potenciál második deriváltjára

az  $l \neq l'$  esetben kapjuk:

$$\frac{\partial^2 (NV_{ii})}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{l'\alpha'}} = Z^2 e^2 \left\{ -\frac{\varphi''_{\eta}(r) r_{\alpha'} r_{\alpha}}{r^2} + \frac{\varphi'_{\eta}(r)}{r} \left[ \frac{r_{\alpha'} r_{\alpha}}{r^2} - \delta_{\alpha\alpha'} \right] \right\}_{r=R_l-R_{l'}} + \\ + Z^2 e^2 \cdot \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left\{ k_{\alpha} k_{\alpha'} \cdot \frac{1}{k^2} e^{-k^2/4\eta^2} \cdot e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_l-\mathbf{R}_{l'})} \right\}$$

és  $r_{\alpha}$  az  $\mathbf{r}$  vektor  $\alpha=(x, y, z)$  komponensét jelenti.

Az  $l=l'$  deriváltak a legegyszerűbben a potenciál eltolással szembeni szimmetriájából adódó [5], [6]

$$\sum_{l'} \frac{\partial^2 V}{\partial R_{l\alpha} \partial R_{l'\alpha'}} = 0 \quad (3.25)$$

összefüggésből számíthatjuk ki, mint az  $l \neq l'$  tagok összegét. A dinamikai mátrixra ezután a (2.14) definíció alapján nyerjük:

$$D_i(\mathbf{q})_{\alpha\alpha'} = \frac{Z^2 e^2}{M} \left\{ \sum_{l \neq l'} N_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{l'}^0; \eta) \cdot (e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{l'}^0)} - 1) + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{\Omega} \sum_l \sum_{\mathbf{k} \neq 0} k_{\alpha} k_{\alpha'} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{l'}^0)} \cdot \frac{e^{-k^2/4\eta^2}}{k^2} \right\} - \frac{Z^2 e^2}{M} \{q = 0\}, \quad (3.26)$$

ahol

$$N_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) = -\varphi''_{\eta}(r) \cdot \frac{r_{\alpha} r_{\alpha'}}{r^2} + \frac{\varphi'_{\eta}(r)}{r} \left( \frac{r_{\alpha} r_{\alpha'}}{r^2} - \delta_{\alpha\alpha'} \right) \quad (3.27)$$

és a  $\{q=0\}$  jelölés az előző ugyanilyen zárójelben levő tag  $q=0$  helyett vett értékét jelenti. A második tagban nem zártuk ki az  $l=l'$  tagot, mivel ez a  $\{q=0\}$  tagba is beírva, egyszerűen kiesik.

A második összegben a periodikus rácsvektorokra vett összegzés után csak azon  $\mathbf{k}$  vektorokra kell összegezni, amelyekre fennáll a

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G} = 0 \quad (3.28)$$

egyenlőség valamely  $\mathbf{G}$  reciprokrács-vektor mellett, amikor is az összeg értéke  $N$ , tehát

$$D_i(\mathbf{q})_{\alpha\alpha'} = \frac{Z^2 e^2}{M} \left\{ \sum_{l \neq 0} N_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_l^0; \eta) \cdot (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l} - 1) + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G})_{\alpha} (\mathbf{q} + \mathbf{G})_{\alpha'}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{-\frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2}{4\eta^2}} \right\} - \\ - \frac{Z^2 e^2}{M} \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{G_{\alpha} G_{\alpha'}}{|\mathbf{G}|^2} e^{-G^2/4\eta^2}. \quad (3.29)$$

A formulából látjuk, hogy a  $\{ \}$  zárójel első tagjában szereplő  $N$  függvény „örökölte” az  $\text{erfc}$  függvény exponenciális lecsengését nagy argumentum esetén, ezért a direkt rácsra vett összeg voltaképpen egy rövid hatótávolságú „potenciálból” számolt dinamikai matrix, értéke  $\mathbf{q}=0$ -nál zérus és  $\mathbf{q}$  szerint Taylor-sorba fejthető.

A  $\mathbf{G}$  szerinti összeget célszerű két részre bontani:

$$\frac{4\pi}{\Omega_0} \frac{q_\alpha q_{\alpha'}}{q^2} + \frac{4\pi}{\Omega_0} \left\{ \frac{q_\alpha q_{\alpha'}}{q^2} (e^{-q^2/4\eta^2} - 1) + \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G})_\alpha (\mathbf{q} + \mathbf{G})_{\alpha'}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{-\frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2}{4\eta^2}} \right\}.$$

Minthogy a  $\mathbf{q}$  vektor a  $\mathbf{q}=0$  körüli Wigner—Seitz poliéder (azaz a Brillouin zóna) belsejében van, a második összeg  $\mathbf{q}$ -nak differenciálható függvénye és (3.29) harmadik tagjával a  $\mathbf{q}=0$  helyen éppen eltűnik. Eredményünk tehát

$$D_i(\mathbf{q})_{\alpha\alpha'} = \frac{4\pi Z^2 e^2}{M\Omega_0} \cdot \frac{q_\alpha q_{\alpha'}}{q^2} + \sum_{\beta, \gamma = x, y, z} d_{\alpha\alpha'; \beta\gamma} q_\beta q_\gamma + o(q^4). \quad (3.31)$$

A másodrendű sorfejtési együtthatókat  $d$ -vel jelöltük. A kristály szimmetriája miatt az is könnyen bizonyítható, hogy csak párosrendű tagok lépnek fel.

A (3.31) kifejezés első tagja a  $\mathbf{q}=0$  pontban nem analitikus, határértéke függ  $\mathbf{q}$  irányától. Ennek egyik következménye, hogy ha a (2.15) sajátértékegyenletben  $\mathbf{q}$ -irányú (longitudinális) polarizációs vektorral próbálkozunk és a  $\mathbf{q}$  vektor abszolút értéke zérus felé közelítjük, azaz

$$f(\mathbf{q}, \lambda) \rightarrow f_{\text{long}}(\mathbf{q}, \lambda) = \mathbf{q}/|\mathbf{q}|$$

az egyenlet a

$$\frac{4\pi Z^2 e^2}{M\Omega_0} \mathbf{f}_{\text{long}} = \omega^2 \mathbf{f}_{\text{long}} + o(q^2)$$

alakot ölti, más szóval a longitudinális rezgések határfrekvenciája Bravais-rács esetén nem zérus, hanem

$$\omega_{\text{long}}^2(0) = \frac{4\pi Z^2 e^2}{M\Omega_0} \equiv \omega_p^2, \quad (3.32)$$

mint azt a 2. ábrán is megfigyelhetjük.

A mozdulatlan háttéren mozgó ionrács tehát olyan rendszer, amelyben *nincs longitudinális hang*; a rezgések frekvenciája nem arányos a hullámhossz reciprokéval ( $q/2\pi$ -vel), hanem *állandó* értékhez tart. Ez első pillanatra meglepő, hiszen teljesen általánosnak látszó tétel [5] biztosítja hangszerű rezgések fellépését, tetszőleges kölcsönhatások esetén. Az idézett tétel bizonyítása azonban felhasználja azt a tényt, hogy a dinamikai matrix  $\mathbf{q}=0$  körül sorbafejthető, ami ekvivalens véges hatótávolságú, azaz elegendően gyorsan lecsengő erők feltevésével. Formálisan ugyanis most is igaz, hogy a  $\mathbf{D}_i$  matrix a  $\mathbf{q}=0$  pontban eltűnik, ekkor ti. a  $\mathbf{G}=0$  tag és az abból keletkező szingularitás nem lép fel, azonban a matrix *határértéke* nem  $D_i(0)$  ebben a pontban, a függvény  $\mathbf{q}$ -szerinti Taylor-sora nem létezik. Ez a Coulomb erők  $\sim 1/r$ -szerű viselkedésének következménye, hiszen a  $\mathbf{q}$  szerinti sor együtthatói, melyek éppen a potenciál-deriváltak koordinátákkal vett kombinációinak rácsösszegei, (lásd (2.14)), ebben az esetben divergens kifejezések.

Ezt a formális érvelést fizikailag a következőképpen világíthatjuk meg. Jöjjön létre az ionrácsban síkhullámszerű sűrűség-hullámzás, miáltal a pozitív törtésű síkok közelebb, illetve távolabb kerülnek egymástól a negatív háttéren. A Poisson-egyenlet értelmében makroszkopikus téreőr lép fel, melynek *divergenciája* a töltés-sűrűséssel egyenlő, tehát a *téreőrösség* az *elmozdulásokkal* lesz arányos — a mozgás hullámhosszától *függetlenül*. A téreört tehát nem a szomszédos síkok *relatív* elmoz-



dulása, hanem a síkhullámban résztvevő összes síkok együttesen határozzák meg, az illető sík fázisán keresztül. Formálisan, a mozgó sík bármely ionjára a mozgásegyenlet:

$$M\ddot{\mathbf{R}}_l = Ze\mathbf{E}(\mathbf{R}_l).$$

A tér meghatározása céljából vezessük be a csak diszkrét  $\mathbf{R}_l^0$  pontokban értelmezett elmozdulásvektorok helyett a folytonosan értelmezett  $\xi(\mathbf{R})$  elmozdulás-teret: hosszú hullámok ( $\lambda \gg$  rácsállandó) esetén ez indokolt. Ha a síkhullám terjedési iránya az  $x$  tengely, a probléma egyetlen térbeli változója  $x$ , tehát a Poisson egyenletből

$$\frac{dE_x}{dx} = -4\pi \frac{Ze}{\Omega_0} \frac{d\xi_x}{dx}.$$

A triviális kezdeti feltételt felhasználva

$$E_x = -\frac{4\pi Ze}{\Omega_0} \xi_x,$$

vagyis a síkok rezgésére a hullámhossztól független

$$\ddot{\xi}_x = -\frac{4\pi Z^2 e^2}{M\Omega_0} \xi_x = -\omega_p^2 \xi_x$$

egyenletet kapjuk, minden, a rácsállandóhoz képest elég nagy hullámhossz esetén\* (Mivel a fentiek folytonosan eloszló  $\frac{Ze}{\Omega_0}$  sűrűségű plazmára is érvényesek, a nyert határfrekvenciát plazmafrekvenciának nevezik.)

Longitudinális hang helyett tehát „longitudinális optikai” rezgést kapunk, akárcsak egy ionkristályban, ahol a kétféleképpen töltött síkok egymással szemben is mozoghatnak. Valójában ez is történik: a mozdulatlan háttérhez képest mozog az ionrács. Várhatjuk tehát, hogy ha „engedjük” a negatív háttérteret is mozogni — más szóval a merev-háttér dinamikai matrixhoz hozzáadjuk az elektron-polarizációs tagokat és ezzel „visszavisszük” a fémmodellbe az adiabatikusan reagáló negatív töltéseket, a fenti „logitudinális optikai” ág a kísérletileg észlelt logitudinális hangrezgéssé módosul (l. 4. fejezet). Ami a transzverzális hosszúhullámú rezgéseket illeti, ezek a merev-háttér modellben is fellépnek, hiszen nyírási-jellegű elmozdulások nem vezetnek makroszkopikus tér fellépésére, azonban mind a transzverzális hangsebességek, mind pedig a rövid hullámhosszú rezgések frekvenciái általában igen távol állnak a kísérleti értékektől; az elektron-polarizációs tagok járuléka ezeket az értékeket is jelentősen befolyásolja. Végül, egyszerű példaként a frekvenciákat közvetlenül felírhatjuk a rács valamely szimmetriatengelye (mondjuk  $z$ -tengely) irányában terjedő rezgésekre. Ilyenkor [5] a  $\mathbf{D}$  matrix diagonális (ez (3.29)-ből is azonnal látszik) és elemei így éppen a megfelelő frekvenciák négyzetei;  $D_{zz}$  a  $z$ -irányba polarizált longitudinális,  $D_{xx}$  és  $D_{yy}$  a merőlegesen (transzverzálisan) polarizált frekvenciákat szolgáltatják (ez utóbbiak minden, legalább 3-fogásos szim-

metriatengely esetén elfajultak):

$$\omega_{\text{long}}^2 = \frac{Z^2 e^2}{M} \left\{ \sum_{l \neq 0} N_{zz}(\mathbf{R}_l^0; \eta) (e^{iq\mathbf{R}_l^0 \cdot \mathbf{z}} - 1) + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \frac{(q + G_z)(q + G_z)}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{-\frac{(q + \mathbf{G})^2}{4\eta^2}} - (1 - \delta_{\mathbf{G},0}) \frac{G_z^2}{G^2} e^{-G^2/4\eta^2} \right\} \quad (3.33a)$$

és a transzverzális, kétszeresen elfajult frekvenciára

$$\omega_{tr}^2 = \frac{Z^2 e^2}{M} \left\{ \sum_{l \neq 0} N_{xx}(\mathbf{R}_l^0; \eta) (e^{iq\mathbf{R}_l^0 \cdot \mathbf{z}} - 1) + \right. \\ \left. + \frac{4\pi}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} G_x^2 \left[ \frac{e^{-(q + \mathbf{G})^2/4\eta^2}}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} - \frac{e^{-G^2/4\eta^2}}{G^2} \right] \right\}. \quad (3.33b)$$

A transzverzális frekvencia képletében elhagyhatjuk a  $\mathbf{G}$ -re vett összeg mellékfeltételét, hiszen a  $\mathbf{G}=0$  tag mindenképpen hiányzik. Bebizonyítható, hogy az *egyszerű* rácsok esetén a (3.29) képlet, illetőleg speciálisan a fenti (3.33) formulák minden  $\mathbf{q}$ -ra (a Brillouin zónán belül) pozitív  $\omega^2$ -ra vezetnek, azaz ilyen szerkezetekre a ionrács dinamikailag stabil (ellentétben a néhány kétatomos rács esetével, amint említettük).

#### 4. Egyszerű fémek egyensúlyi tulajdonságai és rácsrezgései

##### 4.1. A homogén elektronfolyadék

Láttuk, hogy a negatív háttér „megmerevítésével”, azaz az elektron-dinamika elhanyagolásával olyan hipotetikus fémhez jutottunk, mely külső kényszer nélkül semmilyen rácsállandó mellett sem stabilis. Ezt a külső kényszert a valóságban a (2.8), (2.12) egyenletekben szereplő  $E_{el}$  elektronenergia szolgáltatja.

Az  $E_{el}$  energia *egzaktt* meghatározása a (2.8a) egyenlet alapján teljesen reménytelen feladat, hiszen már a két elektront tartalmazó hidrogénmolekula esetén sem lehetséges. Többtestproblémával állunk szemben, amelynek lényege nem „kristály”-eredetű: ha (2.8a)-ben egyszerűen elhanyagoljuk az ionok helyét és valódi potenciálját tartalmazó  $H_{ie}$  tagot és csak a

$$\hat{H}_{ee}(\hat{p}_i, \hat{r}_i) \psi_{el}^{(0)} = E_{el}^{(0)} \psi_{el}^{(0)} \quad (4.1)$$

egyenletet tekintjük, a feladat soktesztprobléma jellege, alapvető bonyolultsága nem változik. Célszerűnek látszik, hogy először is ezzel a problémával, az elkent pozitív háttéren mozgó ún. *homogén elektronfolyadék* problémájával foglalkozunk. (A (2.8a)-ból  $H_{ie}$  elhagyásával nyert (4.1) egyenlet megoldásait a (0) indexszel láttuk el.) A feladat közelítő megoldásai általában bonyolult módszereket igényelnek [8], itt csak néhány alapfogalomra szeretnék kitérni. Ismeretes, hogy a 4.1 Schrödinger-egyenlet legalacsonyabb energiához tartozó (normált) sajátfüggvénye olyan tulajdonságú, hogy ebben az állapotban  $\hat{H}_{ee}$  átlagértéke abszolút minimumot ér el (és értéke éppen  $E_{el}^{(0)}$ ). Kereshetjük tehát — valamilyen reálisnak tűnő függvényosztályban — azt a  $\psi_{el}^{(0)}$  közelítő hullámfüggvényt, melyre a  $(\psi_{el}^{(0)} | H_{ee} | \psi_{el}^{(0)})$  átlagérték

minimális és a kapott értéket  $E_{el}^{(0)}$  közelítő értékének tekintjük. Ennek birtokában majd a (2.8a) egyenlet — hasonlóan közelítő — megoldását a  $\hat{H}_{ie}$  hatását tekintetbe vevő perturbációs sor alakjában vesszük figyelembe:

$$E_{el} = E_{el}^{(0)} + E_{el}^{(1)} + E_{el}^{(2)} + \dots \quad \psi_{el} = \psi_{el}^{(0)} + \psi_{el}^{(1)} + \psi_{el}^{(2)} + \dots \quad (4.2)$$

Az alapállapotra vonatkozó legegyszerűbb feltevés mindenestre az, ha  $\psi_{el}^{(0)}$ -t egyszerűen a  $\Omega$  térfogatú „dobozba” zárt egyelektron-síkhullám függvények és elektron-spin függvények antiszimmetrikus szorzataként állítjuk elő:

$$\psi_{el}^{(0)} \sim \det \left\{ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \cdot \chi_i(\sigma_j) \right\}, \quad (4.3)$$

ahol  $\mathbf{r}_j$ ,  $\sigma_j$  jelentik az  $N \cdot Z$  számú elektron valamelyikének koordináta- és spin-változóit, és a  $\mathbf{k}$  hullámszám-vektorok mindhárom komponense —  $L$  élhosszúságú kocka alakú dobozt feltételezve — a  $2\pi/L$  egész számú többszöröse lehet. Ez azt jelenti, hogy a  $d\mathbf{k}$  méretű „térfogatelem”

$$n(d\mathbf{k}) = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 d\mathbf{k} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} d\mathbf{k} \quad (4.4)$$

különböző  $\mathbf{k}$  értéket tartalmaz. A  $\chi_i$  spinfüggvények mindegyike az elektron két lehetséges spinállapotának egyikét jelöli. Tekintve, hogy a Pauli elv értelmében minden állapotban csak egyetlen elektron lehet, minden állapotot kétféle spinű elektronnal betöltve, összesen  $N \cdot Z/2$  különböző  $\mathbf{k}$  értékre van szükség. Ezek közül a legnagyobb az abszolút értéke nyilvánvalóan a

$$\frac{4\pi}{3} k_F^3 \cdot \frac{\Omega}{(2\pi)^3} = \frac{N \cdot Z}{2}$$

egyenletből adódik, tehát a legnagyobb betöltött  $|\mathbf{k}|$  érték, az ún. Fermi hullámszám értéke

$$k_F = (3\pi^2 Z/\Omega_0)^{1/3} = (9\pi/4)^{1/3} \cdot \frac{1}{r_s}, \quad (4.5)$$

ahol a  $\frac{4\pi}{3} r_s^3 = \Omega_0/Z$  definícióval bevezettük az „egy elektronra jutó gömb” sugarát.

Világos, hogy  $r_s = Z^{-1/3} \cdot R_a$ . A fenti determináns-hullámfüggvény (4.1) alapján a következő eredményre vezet:

$$E_{el}^{(0)} = \frac{2}{N} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \frac{1}{2N} \sum_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| \leq k_F} \int \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (4.6)$$

Az első tag az átlagos kinetikus energia. Az egyenletes töltéssűrűségű elektron-folyadék közönséges „Coulomb-energiája” éppen egyenlő a  $H_{ee}$ -ben szereplő állandó negatívjával és így eltűnt az eredményből; ami megmaradt, az a (4.3) hullámfüggvény abszolútérték-négyzetében fellépő, a parallel spinű elektronállapotokból származó ún. „kicszeréldési töltés” potenciális energia járuléka [8]. Az integrálás



után (4.4) felhasználásával az egy elektronra jutó energiát illetően a

$$\frac{1}{Z} E_{el}^{(0)} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 - \frac{3e^2}{4\pi} k_F \quad (4.7)$$

eredményre jutunk. Az elektron átlagos kinetikus energiája tehát  $r_s$  csökkenésekor  $1/r_s^2$ -el arányosan növekszik. Bár ilyen eredmény „levezethető” egy olyan feltevésből is, mely szerint az elektronok ténylegesen kis  $r_s$  sugarú gömbökben vannak lokalizálva és ezáltal impulzusuk és egyben kinetikus energiájuk a határozatlansági összefüggés miatt hasonlóan változna, ne feledjük, hogy itt az átlagos impulzusnégyzet növekedése a *Pauli-elv* következménye és minden elektron számára nyitva van az út az egész kristályon keresztül. A kicserélődési energia  $\sim e^2/r_s$  alakja azt sugallja, hogy minden elektron körül egy  $\sim r_s$  sugarú „holdudvar” keletkezik, mely arra vezet, hogy a kompenzáló pozitív háttéren mozgó elektron kis potenciálvölgybe kerül. Ez a kép lényegében helyes is, csak nem szabad elfelejtenünk, hogy a (4.3) hullámfüggvény esetén a parallel spinű elektronállapot-párok vezetnek a (4.7)-ben fellépő negatív energiataghoz; tehát az a tény, hogy egy adott elektron körül az *ellentétes* spinű partnerek is „félrehúzódnak” és a valóságban megnövelik a „holdudvar” hatását — ebben a leírásban egyáltalán nem jelentkezik. Ha a (4.3) hullámfüggvénynél jobb közelítéseket [8] alkalmazunk, a fenti energiakifejezéshez az  $\epsilon_{\text{kor}}$  ún. korrelációs energia értéke járul:

$$\frac{1}{Z} E_{el}^{(0)} = \frac{\alpha}{r_s^2} - \frac{\beta}{r_s} + \epsilon_{\text{kor}}(r_s), \quad (4.8a)$$

ahol az atomfizikában használatos hosszúságegység ( $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0,529 \times 10^{-8}$  cm) és energiaegység ( $e^2/2a_0 = ry = 13,605$  eV) használata esetén

$$\alpha = 2,2099ry \cdot a_0^2; \quad \beta = 0,9163ry \cdot a_0. \quad (4.8b)$$

A korrelációs energiára több becslés ismeretes; a fémfizikában *Nozières* és *Pines* interpolációs formuláját [8] szokás használni:

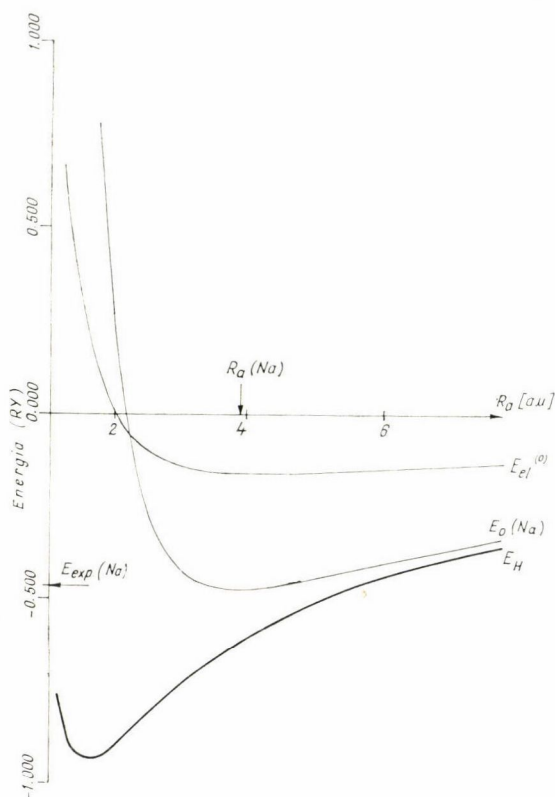
$$\epsilon_{\text{kor}}(r_s) = -0,115 + 0,031 \log(r_s) \quad [ry]. \quad (4.8c)$$

A homogén elektronfolyadék energiájában tehát kis  $r_s$ -nél a taszító kinetikus energia, nagy  $r_s$ -nél a vonzó kicserélődési tag dominál, mint ezt a 3. ábrán láthatjuk. Bár a görbe menete első pillantásra azt sugallja, hogy  $E_{el}^{(0)}$  önmagában jó fémmodell volna (a teljes energia egy reális,  $r_s \sim 4,25a_0$  értéknél minimális, értéke negatív), azonnal kiderül, hogy mind a 3. fejezetben kiszámított Madelung energia, mind pedig a  $H_{ie}$ -vel kapcsolatos, (4.2)-ben  $E_{el}^{(i)}$ -vel jelölt tagok a reális fém kötésében fontos szerepet játszanak. Az egy ionra jutó fémes energiának, a (2.12)-ben definiált  $E_0$  mennyiségnek az abszolút energiaskálán mélyebben kell feküdnie, mint amennyi a kötésben résztvevő elektronok teljes energiája *atomos* állapotban, különben a fém ki sem alakul. A két energia különbsége a  $T=0$  K-re extrapolált párolgási hő, azaz az  $E_c$  kötési energia:

$$E_0 = - \sum_{\lambda=1}^Z I^{(\lambda)} - E_c. \quad (4.9)$$

Itt a jobboldal első tagja, a teljes energia az *atomban*, az első  $Z$  ionizációs energia (negatív) összegeként van felírva. Pl.  $Na$  esetén ( $Z=1$ )  $I^{(1)}=0,38\text{ ry}$ , tehát látjuk, hogy  $E_{el}^{(0)}$  minimális értéke, a  $-0,163\text{ ry}$  irreálisan kicsiny (abszolút értékben). A 3. ábrán a (2.12) teljes fémes energia képletében  $E_{el} \rightarrow E_{el}^{(0)}$  helyettesítéssel kapható

$$E_H = E_{el}^{(0)} + V_{ii}(\mathbf{R}_1^0 \dots \mathbf{R}_N^0) = E_{el}^{(0)}(r_s) - \frac{Z^2 e^2}{2} \frac{M}{R_a} \quad (4.10)$$



3. ábra. A homogén elektronfolyadék (4.8)  $E_{el}^{(0)}$ , a fémes hidrogén (4.10)  $E_H$  és a nátrium  $E(Na)$  teljes energiája az ionsugár függvényében,  $Z=1$ .

menyiséget is ábrázoltuk. (A szerkezet szerepe itt teljesen lényegtelen, hiszen  $E_{el}^{(0)}$  szerkezetfüggetlen, a Madelung energia értéke pedig, mint láttuk, a szabályos szerkezetekre közel egyforma. Az ábrán egyébként a lapcentrált szerkezetre számolt görbe látható.)

A 3. ábrán felrajzoltuk egy valódi fém, a nátrium energiájának atomsugár-függését is.

Minthogy

$$E_0 - E_H = E_{el}^{(1)} + E_{el}^{(2)} + \dots + \sum \frac{\hbar \omega_s}{2} \quad (4.11)$$

és a zéruspont-energia a kötési energiában általában elhanyagolhatóan kis mennyiség, látható, hogy az  $E_{el}^{(i)}$  tagok szerepe igen jelentős. A következő fejezetben megmutatjuk, hogy az energia *térfogat-függését* elsősorban  $E_{el}^{(1)}$  befolyásolja, míg az  $E_{el}^{(2)}$ ,  $E_{el}^{(3)}$  stb. tagok a rács szerkezetét és dinamikáját szabják meg.

#### 4.2. Átlagos ion-elektron kölcsönhatás és a fémek sűrűsége

A homogén elektronfolyadék modellt egyrészt a pozitív háttér „elkentsége” jellemzi, másrészt az, hogy a pont-elektronok a háttérrel Coulomb-kölcsönhatásban vannak. Ez utóbbi feltevés az, ami egy valódi fémre „átlagosan” sem igaz, hiszen az elektronok az ion-törzsön belül — és ez nem elhanyagolható térrész, az egyetlen fémes hidrogén esetét kivéve — teljesen más potenciált „éreznek”, mint az ionok között, ahol  $v(\mathbf{r})$ -re a (2.1) feltevést tehetjük. Mielőtt ezt a „teljesen más” potenciált részletesebben megvizsgálánk, nézzük meg, milyen *átlagos* effektusra számíthatunk.

Írjuk e célból  $H_{ie}$ -t — a hasonló kifejezésekről előbb mondottakkal összhangban — a formális divergenciától mentes alakba:

$$H_{ie} = \frac{1}{N} \sum_l \left\{ \sum_i v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l) - \int v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \frac{Z}{\Omega_0} d\mathbf{r} \right\} + \frac{1}{N} \sum_l \int \left\{ v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) + \frac{Ze^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_l|} \right\} \frac{Z}{\Omega_0} d\mathbf{r}. \quad (4.12)$$

Az első tag *átlagértéke* az elektronfolyadék alapállapotában zérus, hacsak ez az állapot olyan, hogy minden egyes elektron megtalálási valószínűsége a térben állandó  $1/\Omega$  érték, amit fel fogunk tételezni.\*

A második tag viszont, mely tehát  $H_{ie}$  átlagértéke,  $l$ -től független tagok összege, így

$$\langle H_{ie} \rangle = \frac{Z^2}{\Omega_0} \left\{ \frac{1}{Z} \int \left[ v(\mathbf{r}) + \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|} \right] d\mathbf{r} \right\} = \frac{Z^2}{\Omega_0} b, \quad (4.13)$$

ahol a  $b$  állandó definíciója mutatja, hogy ez a szám a *szabad* ionra jellemző mennyiség, értéke a szabad ion potenciáljának a  $Z$  töltés Coulomb-potenciáljától való *eltéréstől* függ. Mivel a perturbációs számítás értelmében  $E_{el}^{(1)}$  éppen ez az átlagérték, kapjuk:

$$E_{el}^{(1)} = \frac{Z^2 b}{\Omega_0} = \frac{3Z^2}{4\pi R_a^3} \cdot b \quad (4.14)$$

és a teljes energia a  $H_{ie}$  szerinti perturbációs sor első közelítésében

$$\tilde{E}_0 = V_{ii}(\mathbf{R}_1^0 \dots \mathbf{R}_N^0) + E_{el}^{(0)} + E_{el}^{(1)} = -\frac{Z^2 e^2}{2} \frac{M}{R_a} + Z \left( \frac{\alpha}{r_s^2} - \frac{\beta}{r_s} + \epsilon_{\text{kor}}(r_s) \right) + \frac{3Z^2 b}{4\pi R_a^3} \quad (4.15)$$

\* Ez egyáltalában nem triviális feltevés: a homogén elektronfolyadék  $H_{ee}$  energiaoperátora ugyan tetszőleges eltolással szemben invariáns, a legalacsonyabb energiájú állapot kis sűrűségeknél mégis „elektronkristály”-szerű, nem homogén töltéssűrűségű. A fémekre jellemző  $r_s \sim 2-6$  a. u. értékeknél ez a „szimmetriatörés” nem lép fel.



Ez az energiakifejezés már az általános (2.3)–(2.12) képletek *minden tagjának járulékat* — ha egyszerűsített, átlagolt formában is, — *de tartalmazza*. A modell az *azonos vegyértékű ( $Z$ ) fémek között* a  $b$  állandó segítségével tesz különbséget. Most megmutatjuk, hogy minden esetben  $b > 0$ , azaz  $E_{el}^{(1)}$  *taszító* jellegű energiajárulékot jelent.

Ebből a célból kissé részletesebben meg kell vizsgálnunk  $v(\mathbf{r})$  jelentését. Mit tudunk erről a potenciálról, melyet az iontörzsbe „hatoló” elektron érez? Tudjuk, hogy az atommag felé közeledve egyre nagyobb vonzó töltés hatása érvényesül, hiszen a mag töltését árnyékoló elektronfelhő *belsejébe* hatol: első pillantásra tehát azt gondolhatjuk, hogy a  $-Ze^2/r$ -nél erősebb vonzás miatt  $b < 0$ . Ez a kép azonban félrevezető, mivel a „próbaelektron” és a mag töltést árnyékoló elektronok viselkedése a Pauli-elv figyelembevételével nélkül nem tárgyalható. Egyforma részecskékről lévén szó, tekintetbe kell vennünk, hogy a „próba-elektron” hullámfüggvénye az ion *belsejében* jó közelítésben *ortogonális* lesz a törzs-elektronok állapotfüggvényére (hasonlóan egy külső pályán mozgó *atomi* elektron hullámfüggvényéhez). Ez pedig azt jelenti, hogy az ion belsejébe hatoló elektron hullámfüggvénye nem „sima”, hanem többször előjelet kell váltson, attól függően, mennyi és milyen szimmetriájú törzs-állapot van betöltve, ez pedig egyben a mozgási energia megnövekedését jelenti.

Oda jutottunk tehát, hogy ténylegesen a  $Z$  töltésű ion Coulomb terénél általában sokszorta nagyobb „belső” potenciálban mozog a valencia-elektron, és egyidejűleg a Pauli-elv „kényszere” miatt, hullámfüggvénye az ion belsejében oszcillál, — ugyanakkor mindeddig az elektronok hullámfüggvényét közelítően a „dobozba zárt tömegpont” síkhullám-állapotaival azonosítottuk. Azt, hogy ez a leírás az elektronenergia kiszámítására mégis használható, *Hellman és Kassatotchkin* [2], illetve *Herring* vette először észre és ez képezi a fémek és félvezetők pszeudopotenciál-elméletének alapját. Anélkül, hogy részletekbe bocsátkoznánk [4], megjegyezzük, hogy a fogalmak rendje helyreállítható, ha az *igazi potenciál helyett* (ami tehát egy „hullámzó” hullámfüggvényt befolyásol), *azt a potenciált keressük*, ami a *síkhullámfüggvényre hatna*, ha az *sima* maradna az iontörzs belsejében. Az elvi követelmény az, hogy a keresett potenciál épp olyan szórt hullámra vezessen, mint amit a valódi potenciál eredményez az *iontörzsek közötti térben*.

Az iontörzsön belül a pseudo-hullámfüggvény, amely nem „hullámoz”, semmi kapcsolatban nincs a valódi hullámfüggvénnyel, viszont az iontörzsön belüli hullámfüggvényre most nem is vagyunk kíváncsiak. Mit nyertünk ezzel? Az ionon kívüli „sima” hullámfüggvény (pl. síkhullám) most „hullámozás” nélkül hatol be a törzsbe — azaz elhanyagoljuk a Pauli-elv miatt megnövekvő kinetikus energiát, ami pedig az igazi elektront „átsegíti” a mély vonzó potenciálon. Világos, hogy kompenzálhatunk: a modellbeni *pszeudopotenciált* az *igazi potenciálnál* jóval *gyengébbnek*, sekélyebbnek választhatjuk. Hangsúlyozzuk, hogy a pszeudopotenciál a *szabad ionhoz* rendelt mennyiség, alkalmas a fém-*atom* legkülső elektronja energiaspektrumának meghatározására is, — a hullámfüggvényt persze itt is oszcilláció nélkül adja vissza.

Amikor tehát — mint eddig mi is tettük — az elektron-állapotokat első közelítésben egyrészecske-síkhullámokkal azonosítjuk, (l. pl. (4.3), (4.6) stb.), a  $v(\mathbf{r})$  potenciál éppen a „gyenge” pszeudopotenciál kell legyen. A részletes vizsgálatok szerint [4] a pszeudopotenciál jó közelítéséhez jutunk, ha az ionon belül véges gömbszimmetrikus potenciálgödört tételezünk fel; a gödör mélysége a síkhullám gömbhullám-komponenseire általában különböző. A tapasztalat szerint első közelítésben már a

legegyszerűbb, *Ashcrofttól* [9] származó modell-potenciál is használható:

$$v(\mathbf{r}) = \begin{cases} -Ze^2/|\mathbf{r}| & |\mathbf{r}| > R_c \\ 0 & |\mathbf{r}| \leq R_c \end{cases} \quad (4.16)$$

ahol az  $R_c$  „ionrádiusz” — amint a (2.1) képletnél már megjegyeztük — atomfizikai adat; például a szabad atom ionizációs energiájából határozható meg. (Fizikailag  $R_c$  annak a gömbnek a sugarával áll kapcsolatban, melynek belsejében a *valódi* hullámfüggvény még nem „sima”, hanem oszcillál.) Most már válaszolhatunk a *b* előjelére vonatkozó kérdésre: *b pozitív*, mivel a *potenciál helyett* a (síkhullám-közelítést alkalmazó) számításainkban megjelenő *pszeudopotenciál* nem erősebb, hanem *gyengébb* az iontörzsben, mint a  $Z$  töltésű ion Coulomb-potenciálja volna. Ez általános érvényű megállapítás. Speciálisan, a (4.16) Ashcroft potenciál esetén (4.13) szerint

$$b = 2\pi e^2 R_c^2. \quad (4.17)$$

A  $V$  potenciál pontosabb meghatározása vagy úgy történik, hogy a szabad atom energiaspektrumát reprodukálják egy több paramétert tartalmazó potenciálfüggvény illesztésével, vagy a *fém*es állapot energiasáv-szerkezete alapján rögzítik  $V$  Fourier-komponenseit. A (4.15) egyenlethez visszatérve látjuk, hogy az alapállapot energiában  $E_{el}^{(1)}$  járuléka  $1/r_s^3$ -el arányos taszító tagként jelentkezik. A 3. ábrán felrajzolt  $E_0(N_a)$  görbét úgy nyertük, hogy  $R_c$  értékét a nátrium-ion kísérletileg meghatározott, ún. Pauling-sugarával azonosítottuk. A kísérleti értékekkel mind a minimum *értéke*, mind *helye* jól egyezik, a görbülettel fordítva arányos kompresszibilitás értékét is jó közelítésben kapjuk. A nátrium esetén illusztrált helyzet tipikus szinte valamennyi fém esetén (l. 4.4. fejezet) — az egyetlen kivétel a *hidrogén* fémes módosulata. Ez a fém földi viszonyok között nem létezik, mivel zérus nyomáson a hidrogénmolekulákból álló van-der Waals kristály energiája kisebb, mint a (4.15) alapján  $b=0$ -val számolt minimum, azaz (4.10) minimuma. Nagy nyomáson azonban a kisebb térfogaton stabil fémes állapot lesz az előnyös: a szükséges néhány millió atmoszféra nyomás a Jupiter belsejében például valószínűleg jelen van. A 3. ábra  $E_H$  görbéje így *fizikai értelemmel rendelkezik*: ez a fém-hidrogén közelítő állapotegyenlete  $T=0$ -nál.

A (4.15) egyenletben szabályos szerkezetek esetén a Madelung-állandót 1,80-al közelíthetjük, miáltal a teljes energiát *kizárólag* a fém *térfogatától függő* tagok összegként állítottuk elő. Ez a modell első közelítésben jó leírást ad az egyensúlyi rács-állandó, kötési energia, kompresszibilitás szempontjából szinte valamennyi fém esetén — csak az utóbbi értékét becsüli alá  $Z>2$  esetén, mint ezt a 2. táblázat mutatja. Itt  $M=1,80$  mellett a (3.15)-ben szereplő  $b$  értékét a szabad ion energia-nívóinak reprodukálása útján határozták meg. A  $\kappa$  kompresszibilitás definíciója szerint

$$1/\kappa \equiv B_{T=0} = -\Omega \left( \frac{\partial p}{\partial \Omega} \right)_{T=0} = \frac{1}{12\pi R_a} \left( \frac{\partial^2 E_0}{\partial R_a^2} \right), \quad (4.18)$$

ahol felhasználtuk, hogy egyensúlyban  $-\frac{\partial E_0}{\partial R_a}=0$ . A fémes állapot létrejötté, a fémes kohézió tehát annak az egyensúlynak az eredménye, mely a *vonzó* Madelung (elektrosztatikus) energia és az elektronok kicserélődési és korrelációs energiája, valamint a *taszító* elektron-kinetikus energia és az ugyancsak taszító  $E_{el}^{(1)}$  között



## 2. TÁBLÁZAT

Fémek egy ionra jutó energiája, az átlagos atomrádiusz és a térfogati modulus számított és észlelt értékei [4]. A számítást az energia (4.15) első közelítése alapján végezték, a  $b$  állandó értékét az ion energianívóit reprodukáló potenciál (*Animalu és Heine, Phil. Mag. 12, 1249, 1965*) átlagolása útján nyerték.

Elem	$R_c = \sqrt{\frac{b}{2\pi e^2}}$	$R_a$		$-E_0/Z$		$B=1/\alpha$	
		elm.	kis.	elm.	kis.	elm.	kis.
Li	1,71	3,76	3,23	0,513	0,517	92	123
Na	1,89	4,24	3,93	0,457	0,459	56	75,6
K	2,41	5,36	4,88	0,369	0,388	22	35
Be	1,14	3,07	2,36	0,995	1,135	65	1004
Mg	1,48	3,70	3,34	0,852	0,889	323	369
Ca	1,30	4,48	4,12	0,722	0,727	156	183
Ba	2,38	5,41	4,66	0,613	0,627	76	103
Zn	1,15	3,09	2,90	0,991	1,054	625	615
Cd	1,27	3,30	3,26	0,937	0,999	500	473
Hg	1,04	2,88	3,35	1,05	1,097	833	282
Al	1,24	3,26	2,98	1,32	1,386	1154	771
Ga	1,16	3,09	3,15	1,38	1,472	1379	568
In	1,31	3,38	3,47	1,28	1,352	805	411
Tl	1,16	3,09	3,58	1,38	1,436	1379	358
Sn	1,24	3,26	3,51	1,69	1,769	2001	579
Pb	1,20	3,18	3,65	1,73	1,813	2192	459

kialakul. Ennek eredményeképpen az energia a térfogat függvényében minimummal rendelkezik, éspedig olyan minimummal, mely az ionizációs energiánál mélyebb.

Az egyelektron-kép alapján szokás a fémes kötést annak tulajdonítani, hogy az atomi hullámfüggvénynek és a fémbeni elektron-hullámfüggvények közötti alapvető különbség a határfeltételekben van: a fémben a *legalacsonyabb energiájú* elektron hullámfüggvénye nem tart exponenciálisan zérushoz nagy argumentum esetén, ezáltal a hozzá tartozó kinetikus energia kisebb az atomi értéknél. Ez ugyan igaz, de nem feledhetjük el, hogy a többi elektron más kvantumállapotba kell kerüljön, és végeredményben az *átlagos* kinetikus energia *nagyobb* lesz, mint az atomban. Hogy ez így van, az a viriál-tételből egyszerűen következik: Coulomb-erők esetén a *teljes* energia és a *kinetikus* energia *átlaga* abszolút értékben *megegyeznek*.

Végül a 2. táblázat  $R_c$  oszlopát az  $R_a$  értékekkel összevetve igazolhatjuk azt a (2.1) képlettel kapcsolatos kijelentésünket, hogy két ion távolsága jóval nagyobb



$2R_c$ -nél. Valóban, az alkáli fémekre igen jó közelítésben

$$R_c/R_a \lesssim 0,5 \quad (4.19)$$

és  $Z \geq 2$  esetén is  $R_c/R_a \lesssim 0,5$ . Ez azt jelenti, hogy a fém egy ionjára jutó gömbnek csak mintegy  $1/8$  része van „kitöltve” az iontörzsszel, az ionok meglehetősen lazán töltik ki a rendelkezésre álló térfogatot. Bár  $R_c$  definíciója nem egyértelmű és a 4.4 fejezetben egy kissé más lehetséges választást mutatunk be, (4.19) általánosan igaznak tekinthető.

A fémek kristályszerkezetének megértése végett természetesen tovább kell lépünk a csak térfogat-függő (4.15) modellnél és figyelembe kell vennünk az elektron-gáz polarizációjából eredő energiajárulékokat is.

#### 4.3. Polarizációs energia és dielektromos állandó

Az előzőekben azt a célt tűztük ki, hogy a  $\psi_{el}^{(0)}$  alapállapotú hullámfüggvényből kiindulva perturbációs módszerrel vegyük figyelembe a  $H_{ie}$  tagot  $E_{el}$  számításában. Láttuk, hogy egy ilyen sor első tagja éppen  $bZ^2/\Omega_0$ . A perturbációs sor további tagjainak számítása azonban nem könnyű, mivel a (4.3) típusú közelítés „naiv” alkalmazása — a homogén elektronfolyadékban ható hosszútávú Coulomb-kölcsönhatás miatt — hibás becslésre vezet. Hozzuk mindennekeelőtt a (4.12) energiát a potenciál Fourier transzformáltjának

$$v(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega_0} \int v(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

és az ionok (3.10)-ben definiált  $S(\mathbf{k})$  struktúrafaktorának segítségével a

$$H_{ie} = \frac{bZ^2}{\Omega_0} + \Omega_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} v_{\mathbf{k}}^* S_{\mathbf{k}}^* \hat{n}_{\mathbf{k}} \quad (4.20)$$

alakba, ahol bevezettük az elektronok sűrűségoperátorának  $\mathbf{k}$ -dik Fourier komponensét:

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_{Nz}) = \frac{1}{\Omega} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}. \quad (4.21)$$

(A (4.20) összegben a  $\mathbf{k}=0$  komponens kimarad, mivel (4.12) első tagjában a potenciálnak az átlagtól való eltérése szerepel.)

Legyen most

$$\hat{h}(\lambda) = \lambda \Omega_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} v_{\mathbf{k}}^* S_{\mathbf{k}}^* \hat{n}_{\mathbf{k}} \quad (4.22a)$$

és tegyük fel, pontosan ismerjük az elektron-rendszer  $\psi_{el}(\lambda)$  sajátállapotát, mely a  $h$  „külső” tér jelenlétében a  $\psi_{el}(\lambda=0)$  állapotából kialakul. Ismeretes [8], hogy egy  $\lambda$  paramétertől függő energiaoperátor esetén a rendszer  $E_{el}(\lambda)$  energiájára

$$\frac{\partial E_{el}}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_{el}(\lambda) \left| \frac{\partial h}{\partial \lambda} \right| \psi_{el}(\lambda) \right\rangle. \quad (4.22b)$$

Minthogy az általunk keresett energia  $E_{el} = E_{el}(\lambda = 1)$ ,

továbbá  $E_{el}(\lambda = 0) = E_{el}^{(0)} + \frac{bZ^2}{\Omega_0}$ , így

$$E_{el} = E_{el}^{(0)} + \frac{bZ^2}{\Omega_0} + \int_0^1 d\lambda \left\langle \psi_{el}(\lambda) \left| \frac{\partial h}{\partial \lambda} \right| \psi_{el}(\lambda) \right\rangle. \quad (4.22c)$$

Az energia teljes megváltozása tehát  $\partial h / \partial \lambda$  átlagértékének a „bekapcsolástól” ( $\lambda = 0$ ) a végleges térértékig vett integrálja. Ide (4.22a) beírásával

$$E_{el} = E_{el}^{(0)} + E_{el}^{(1)} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} v_k^* S_k^* \int_0^1 d\lambda \langle \psi_{el}(\lambda) | \hat{n}_k | \psi_{el}(\lambda) \rangle. \quad (4.23)$$

(Érdemes felfigyelni a (4.22) képletek és a feltöltődő kondenzátor elektrosztatikus energiája közötti formális és fizikai analógiára.)

A (4.20)–(4.23) képletekben persze csak átfogalmaztuk a feladatot:  $E_{el}$  meghatározásához  $\hat{n}_k$  átlagértékét kell ( $\lambda v_k$ ) hatványai szerint haladó sor alakjában előállítani, amivel végül is  $E_{el}$ -nak  $v_k$  hatványai szerinti sorához jutunk.

Vezessük be most a *homogén* elektronfolyadék „sztatikus” dielektromos-állandó függvényeit, pontosabban ezek inverzét a következő módon:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \varepsilon^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_{ex}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \sum_{n=2}^{\infty} \int \varepsilon_n^{-1}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \cdot \varphi_{ex}(\mathbf{r}_1) \dots \varphi_{ex}(\mathbf{r}_n) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_n. \quad (4.24)$$

Itt  $\varphi_{ex}$  egy *külső* töltések (pl. az ionrács) által létrehozott primér elektrosztatikus potenciál,  $\varphi(\mathbf{r})$  pedig az elektronfolyadék „válasza”, átrendeződése *után* kialakult „árnyékolt” potenciál.\* Az ún. lineáris válaszméletben csak  $\varepsilon(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ -t vesszük tekintetbe. (Homogén elektronfolyadék esetén  $\varepsilon$  csak az  $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  vektortól függő mennyiség, általában  $\mathbf{r}$  és  $\mathbf{r}'$  általános függvénye.) Az  $\varepsilon$  függvény definíciója megegyezik a dielektromos állandó szokásos definíciójával.

Az elektron-töltés ( $\varphi_{ex}$  hatására történő) átrendeződése

$$\varphi_{el} = \varphi(\mathbf{r}) - \varphi_{ex}(\mathbf{r}) = \int [\varepsilon^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \varphi_{ex}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \dots \quad (4.25)$$

elektron-potenciálra vezet, amely a Poisson-egyenlet alapján a töltéssűrűséggel, azaz annak  $\mathbf{k}$ -dik komponensével,  $(-en_k)$ -val a

$$k^2 \varphi_{el}(\mathbf{k}) = 4\pi(-en_k) = -4\pi e \langle \hat{n}_k \rangle \quad (4.26)$$

kapcsolatban áll. Ezzel

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_k \rangle = & \frac{k^2}{4\pi e} \left\{ \varphi_{ex}(\mathbf{k}) \left( 1 - \frac{1}{\varepsilon_k} \right) + \right. \\ & \left. + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n} \varepsilon_n^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n) \varphi_{ex}(\mathbf{k}_1) \dots \varphi_{ex}(\mathbf{k}_n) \cdot \delta(-\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) \right\} \end{aligned} \quad (4.27)$$

minthogy az  $\varepsilon^{-1}$  inverz függvény Fourier-komponense egyszerűen  $\varepsilon(\mathbf{k})$  reciproka.

\* Pontosabban  $e \cdot \varphi$ -n egy külső „próbatöltés” potenciális energiáját fogjuk érteni, egyenlőre azonban a próbatöltés és egy fémbeli elektron között nem teszünk különbséget.

A  $\delta$  függvény azért jelenik meg, mert  $\varepsilon_n^{-1}$  valójában csak az  $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})$  különbségektől függ. Tekintve, hogy (4.23) integrandusában éppen  $\langle n_k \rangle$ -t kell kiszámítanunk a  $\varphi_{ex} = \lambda \cdot \Omega_0 \cdot v_k S_k$  potenciális energia hatása alatt (ennek  $-1/e$ -szerese az elektrosztatikus potenciál), kapjuk:

$$E_{el} = E_{el}^{(0)} + \frac{kZ^2}{\Omega_0} + \Omega_0 \sum_{k \neq 0} \frac{k^2}{4\pi e^2} v_k^* S_k^* \int_0^1 d\lambda \left\{ \lambda \left( 1 - \frac{1}{\varepsilon_k} \right) (-v_k S_k) + \right. \\ \left. + \lambda^2 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \varepsilon_2^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) v_{k_1} v_{k_2} / e \cdot S_{k_1} S_{k_2} \cdot \delta(-\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) + O(\lambda^3) \right\}.$$

Az integrálást elvégezve

$$E_{el} = E_{el}^{(0)} + E_{el}^{(1)} + E_{el}^{(2)} + \sum_{n=3}^{\infty} E_{el}^{(n)}, \quad (4.28a)$$

ahol

$$E_{el}^{(2)} = -\frac{1}{2} \Omega_0 \sum_{k \neq 0} |v_k|^2 |S_k|^2 \frac{k^2}{4\pi e^2} \left( 1 - \frac{1}{\varepsilon_k} \right), \quad (4.28b)$$

továbbá  $n \geq 2$  esetén

$$E_{el}^{(n+1)} = \frac{\Omega_0}{n+1} \sum_{k \neq 0} \sum_{k_1, \dots, k_n} v_k^* S_k^* v_{k_1} S_{k_1} \dots v_{k_n} S_{k_n} \frac{k^2}{4\pi e^2} \cdot \left( \frac{1}{-e} \right)^n \cdot \varepsilon_n^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n) \cdot \\ \cdot \delta(-\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n). \quad (4.28c)$$

Hangsúlyozzuk, hogy a fenti sorfejtés *egzakt*, a dielektromos válaszfüggvények bevezetésekor semmiféle közelítést nem tettünk. A probléma válaszfüggvényekkel történő *megfogalmazása* viszont most szemléletes fizikai közelítések alkalmazására nyújt lehetőséget.

Tekintsük először a lineáris válasz esetét. Mint (4.27) mutatja, a perturbáló tér és a sűrűség megváltozása, között a lineáris kapcsolatot a

$$P(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{4\pi e^2} (1 - 1/\varepsilon_k) \quad (4.29a)$$

függvény létesíti. A  $P$  függvényt ugyanakkor a kvantummechanikai perturbációszámítás első rendjében, a homogén elektronfolyadék alap- és gerjesztett állapotai segítségével, elvben, meghatározhatjuk:

$$\langle n_k \rangle^{(1)} = -P(\mathbf{k})(-e\varphi_{ex}(\mathbf{k})); \quad (4.29b)$$

ahol

$$P(k) = 2\Omega \sum_v \frac{|(0|n_k|v)|^2}{E_{el}^{(0)} - \varepsilon_{el}^{(v)*}} \quad (4.29c)$$

Itt a (0) és (v) indexű állapot, ill.  $E_{el}^{(0)}$  és  $\varepsilon_{el}^{(v)}$  a *homogén* elektronfolyadék valódi alap- és gerjesztett állapotai, ill. energiái. (Az energiák különbségében  $E_{el}^{(1)}$  kiesik.)

A  $P$  függvény (4.29c) kifejezésében szereplő állapotokat és energiákat persze nem ismerjük, kivéve az alapállapot energiára nyert (4.8) közelítő kifejezést. Tájékozódás céljából nézzük meg, mire vezet, ha  $\psi_{el}^{(0)}$ -ra a (4.3) síkhullám közelítést vesszük, a gerjesztett állapotokat pedig úgy képzeljük el, hogy egy-egy síkhullám-



elektron a Fermi-gömbön kívüli ( $\mathbf{k}) > k_F$  pályára kerül a  $|\mathbf{k}| \leq k_F$  állapotból. Ebben (az ún. Hartree—Fock) közelítésben közvetlenül kapjuk (az  $\hat{n}_k$  operátor, mint (4.21)-ből látszik, csak olyan  $v$  állapotba „visz át”, melyben egyetlen eddig betöltetlen  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  síkhullám-állapot van betöltve):

$$P_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = P_0(k) = \frac{2}{\Omega} \sum_{|\mathbf{q}| \leq k_F} \frac{2n_q(1 - n_{k+q})}{\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 - \frac{\hbar^2}{2m}q^2} = \frac{m \cdot k_F}{\pi^2 \hbar^2} \cdot f\left(\frac{k}{2k_F}\right), \quad (4.31a)$$

ahol

$$f(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4x}(1 - x^2) \log \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \quad (4.31b)$$

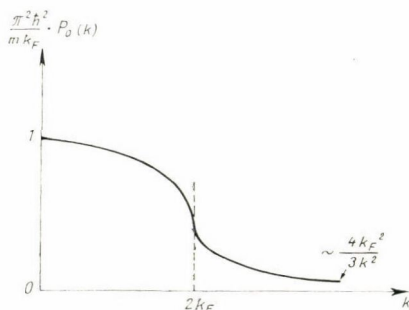
és a betöltési számra

$$n_q = \begin{cases} 1 & |\mathbf{q}| \leq k_F \\ 0 & |\mathbf{q}| > k_F. \end{cases} \quad (4.31c)$$

Az integrálást főérték-értelemben végeztük el, a 2 szorzó a kétféle spinbeállítás miatt lép fel. A  $P_0(k)$  Lindhard-féle függvényt a 4. ábra mutatja.

A dielektromos állandóra nyert

$$1/\varepsilon_{\text{HF}}(k) = 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} P_0(k) \quad (4.32)$$



4. ábra. A Lindhard-féle (4.31)  $P_0$  válaszfüggvény diagramja. A derivált a  $q = 2k_F$  helyen divergens.

HF-közelítés azonban nem kielégítő, mivel figyelmen kívül hagyja azt a tény, hogy az átrendeződő elektron is (hosszú hatótávolságú) elektrosztatikus teret kelt és a *többi* elektron átrendeződését már ez a tér is befolyásolja. Jobb közelítés végett rendezzük át (4.27)-et (4.24)—(4.25) felhasználásával:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_k \rangle &= \frac{k^2}{4\pi e^2} (\varepsilon_k - 1) [e\varphi_{\text{ex}}(k) + e\varphi_{\text{el}}(k)] = \\ &= \tilde{P}(k) \cdot (e\varphi_k), \end{aligned} \quad (4.33)$$

ahol a  $\tilde{P}(k)$  ún. redukált („irreducibilis”) válaszfüggvény a *teljes*, (külső+elektron) potenciál által okozott elektronsűrűség-változást skálázza. A (4.29a) és (4.33) definícióból nyilvánvalóan

$$P(\mathbf{k}) = \frac{\tilde{P}(k)}{1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \tilde{P}(k)} = \frac{\tilde{P}(k)}{\varepsilon(k)}; \quad \varepsilon(k) = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \tilde{P}(k) \quad (4.34)$$

A SCF (self consistent field) közelítés mármost abban áll, hogy a  $P_0(k)$  (4.31)-ben kiszámított válaszfüggvényt  $\tilde{P}(\mathbf{k})$  közelítéseként fogjuk fel, tehát az *elektron-átrendeződés* miatt fellépő tér „*viszacsatoló*” hatását *figyelembe véve* alkalmazzuk a síkhullámpolarizáció képletét:

$$\tilde{P}_{(\text{SCF})} = P_0(k), \quad (4.35)$$

azaz

$$\varepsilon_{\text{SCF}} = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} P_0(k). \quad (4.36)$$

Érdemes külön felírni a  $P(k)$  kifejezését SCF közelítésben ((4.34)—(4.35))

$$P_{\text{SCF}}(k) = \frac{P_0(k)}{1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} P_0(k)}. \quad (4.37)$$

Innen látszik, hogyan származik a SCF közelítésből a HF alak:  $P_{\text{SCF}}$ -et  $\left(\frac{4\pi e^2}{k^2} P_0(k)\right)$  hatványai szerint sorbafejtve az első tag  $P_{\text{HF}}$ . Kicsiny  $k$  esetén viszont az említett sor divergens, az elektronok közötti Coulomb-potenciál hosszú hatótávolságának ( $v_{\text{coul}} \sim 1/k^2$ ) egyenes következményeként. A  $P$  válaszfüggvényt tehát  $P_0$ -ból kiindulva, az elektron-elektron kölcsönhatás „csatolási állandója” szerinti sor alakjában *nem határozhatjuk meg*, a SCF képlet értéke éppen az, hogy az eredményt „felösszegzett” formában tartalmazza.

A (4.35)—(4.37) SCF közelítés még több szempontból nem kielégítő. Így pl. a valódi  $\tilde{P}(k)$  függvény  $k=0$ -nál felvett értéke és a homogén elektronfolyadék  $\kappa_h$  kompresszibilitása közötti

$$\tilde{P}(0) = n_0^2 \cdot \kappa_h \quad (4.38)$$

összefüggés  $P_0(k)$ -ra *nem teljesül*. A SCF közelítés különféle „javított” változataira nem térhetünk ki, csupán idézzük a fémek elméletében általánosan használt [3] alakot:

$$\tilde{P}_{\text{SCF}} = P_0(k) \left\{ 1 - \frac{2\pi e^2}{k^2 + \lambda k_F^2} P_0(k) \right\}^{-1}, \quad (4.39)$$

ahol a

$$\lambda = 2/(1 + 0,0155 \cdot \pi/k_F a_0)$$

definíció biztosítja, hogy  $\tilde{P}(0)$  és (4.8) alapján nyerhető kompresszibilitás összhangban legyenek.\*

Míthogy fémes sűrűségekre  $\lambda \approx 2$  és a (4.39) módosítás elsősorban kis  $k$ -ra jelentős,  $\tilde{P}_{\text{SCF}}(k)$  alatt kvalitatív megfontolásokban néha egyszerűen a (4.31)-ben kiszámított  $P_0$ -t érthetjük. A dielektromos állandó (4.34) alakjából

$$\varepsilon \approx 1 + \frac{k_s^2}{k^2} \quad (k \ll k_F); \quad k_s^2 = 4\pi e^2 \tilde{P}(0) \quad (4.40)$$

A  $\tilde{P}(0) \sim P_0(0)$  esetben  $k_s$  a statisztikus atommodellből ismert  $k_{TF}$  Thomas—Fermi-féle hullámszám;  $k_s$  reciprokát árnyékolási hosszának nevezik. Ha ugyanis  $\varepsilon(k)$  fenti alakját *minden*  $k$  esetén érvényesnek tekintjük, akkor, mint azt egy ponttöltés-keltette  $\varphi_{ex} \sim -Ze^2/r$  potenciál Fourier-transzformációjából látjuk, az eredő

\* Erre a képletre úgy jutunk, hogy a (4.26)-beli  $\varphi_{ei}$  mellett az elektronoknak egy adott elektronra való hatásában a kicserélődést—korrelációt is figyelembe vesszük és (4.33)-ban  $e\varphi_k$ -t egy  $\langle n_k \rangle$ -val arányos taggal egészítjük ki (ld. a (4.24)-gyel kapcsolatban mondottakat). A dielektromos állandó ad hoc feltevést nem tartalmazó meghatározása jelenleg is kutatások tárgya.

árnyékolt potenciál ( $\varphi_k = \varphi_{ex}(k)/\varepsilon(k)$ )  $\varphi \sim e^{-k_s r}/r$  alakú lesz. Igen fontos körülmény azonban, hogy  $\varepsilon$  alakja nagyobb  $k$  esetén nemcsak egyszerűen eltér a (4.40) képlet-től, de *nem analitikus* függvény: deriváltja a  $k=2k_F$  helyen végtelenné válik. Ez a szingularitás, mely a betöltési számoknak a Fermi-gömbön való hirtelen változása miatt lép fel, okozza, hogy a ponttöltés árnyékolása után megvalósuló potenciál az exponenciálisnál lassúbb,

$$\varphi(r) \sim \cos(2k_F r)/r^3 \quad (4.41)$$

lecsengéssel, a „Friedel-oszcillációkkal” tart zérushoz (ld. még 4.5. pont).

A lineáris válaszelméleten túllépő,  $\varepsilon_n^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n)$  válaszfüggvényeket tartalmazó járulékok részletesebb tárgyalásától eltekintünk és csak legfontosabb tulajdonságait említjük meg. Ami  $\varepsilon_2^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  kiszámítását illeti, fontos eredmény, hogy az elemi úton, ezúttal *másodrendű* perturbációs számítással  $P_0$ -hoz hasonlóan nyerhető  $\varepsilon_{2(HF)}^{-1}$  síkhullám-válaszfüggvényből a

$$\varepsilon_{2(SCF)}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \varepsilon_{2(HF)}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) / (\varepsilon_{SCF}(k) \cdot \varepsilon_{SCF}(k_1) \cdot \varepsilon_{SCF}(k_2))$$

előírással nyerhető a SCF közelítés. Kissé bonyolult, de zárt alakban [3] felírható  $\varepsilon_{2(HF)}^{-1}$  is. A válaszfüggvények szerinti sor, mint kiderül, gyorsan konvergál, aminek lényegében az az oka, hogy

$$\varepsilon_n^{-1} \sim \frac{1}{E_F} \varepsilon_{n-1}^{-1} \quad (n > 2).$$

A (4.28)-ban szereplő energiatagok szerepe világossá válik, ha a koordináta-térben, az ionok helyvektorainak függvényeként vizsgáljuk őket. A (4.28a) sor két első tagja csak a térfogattól ( $r_s$ ) függ. A másodrendű tag  $S(\mathbf{k})$  definíciójának felhasználásával és a

$$\Phi(\mathbf{k}) = -\Omega_0 |v(\mathbf{k})|^2 P(\mathbf{k}) \quad (4.42)$$

mennyiség bevezetésével a

$$E_{el}^{(2)} = \frac{1}{2N} \sum_{l,l'} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) e^{ik(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} \right\} - \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \frac{1}{2} \Phi(\mathbf{k})$$

alakú lesz, azaz

$$E_{el}^{(2)} = \frac{1}{2N} \sum_{l \neq l'} F(|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|) + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \Phi(\mathbf{k}) \quad (4.43)$$

alakba írható. Eszerint  $E_{el}^{(2)}$  első tagja az ionok között *párkölcsönhatást* ír le, mely az elektronfolyadék „közvetítésével” jön létre:

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}) e^{ik\mathbf{r}}. \quad (4.44)$$

(4.43) második tagja pedig csak  $\Omega_0$ -tól függ.  $F(r)$  konkrét alakját az ion tulajdonságai ( $v_k$ ) és az elektronsűrűség ( $\varepsilon$ ) szabják meg, de általában igaz, hogy

$$F(r) \sim -\frac{Ze^2}{r} \quad r \rightarrow \infty,$$



ami  $v$  nagy  $|\mathbf{r}|$ -re vett aszimptotikus viselkedéséből ( $v_k \sim -\frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 k^2}$ , ha  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ , tehát

$\Phi_k \sim -\frac{4\pi Z^2 e^2}{\Omega_0 k^2}$ ) következik. Kis argumentumoknál  $F(r)$  oszcillál, ami, mint említettük, a  $\tilde{P}(k)$ -beli logaritmikus szingularitás következménye. (A (4.43) első tagjának divergenciáját a harmadik tag formálisan kompenzálja.)

A fém teljes energiáját úgy kapjuk, hogy (4.28a)-hoz hozzáadjuk a 3.1 pontban vizsgált Madelung-energiát, mely az ionok direkt Coulomb-taszításával kapcsolatos. Az ionok közötti *effektív párkölsönhatást* tehát célszerű  $V_{ii}$  és  $E_{el}^{(2)}$  összege alapján definiálni. Felhasználva (3.1)-et, kapjuk:

$$E_{el}^{(2)} + V_{ii} = \frac{1}{2N} \sum_{l \neq l'} G(|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|) + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}), \quad (4.45)$$

ahol az effektív párkölsönhatási potenciál

$$G(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) + \frac{Z^2 e^2}{|\mathbf{r}|} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \Phi_k + \frac{4\pi Z^2 e^2}{\Omega_0 k^2} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (4.46)$$

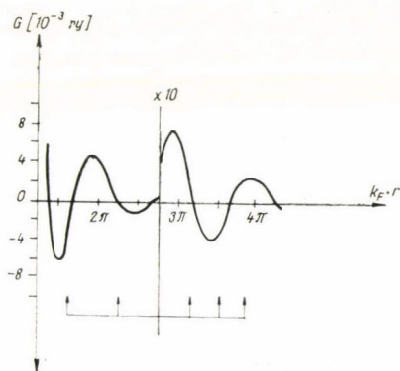
Ezt a függvényt az 5. ábrán láthatjuk, az alumínium  $v(\mathbf{r})$  potenciálja esetén. Az  $F(\mathbf{r})$ -ben levő Coulomb jellegű hosszú hatótávolságú „farok” a direkt ion-ion taszítással együtt éppen eltűnik, így  $G(\mathbf{r})$  viszonylag rövid hatótávolságú a (4.41) oszcillációk lecsengése szabja meg. Ennek a  $G$  effektív ion-ion potenciálnak a „hegyei-völgyei” fontos szerephez jutnak a fémek szerkezetének kialakításánál (4.4 fejezet).

A harmadrendű elektron-polarizációs tagba is beírva  $S(\mathbf{k})$  alakját

$$E_{el}^{(3)} = \frac{1}{N} \sum_l \sum_{l'} \sum_{l''} \left\{ \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} f_3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} e^{i\mathbf{k}_2(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l''})} \right\}, \quad (4.47a)$$

ahol

$$f_3 = \frac{1}{3} \Omega_0 v_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}^* v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} \cdot \frac{k^2}{4\pi e^3} \cdot \varepsilon_2^{-1}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2). \quad (4.47b)$$



5. ábra. Párkölsönhatási potenciál alumínium fém ionjai között. A jelek a szomszédos ionok távolságát mutatják. (Pick, J. Phys. 28, 539, 1967.)

Láthatóan  $E_{el}^{(3)}$  nem bontható két-két ion koordinátájától függő tagok összegére, hanem

$$E_{el}^{(3)} = \sum_{l, l', l''} L(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_{l'}, \mathbf{R}_{l''}),$$

ahol az egyes tagok az  $(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_{l'}, \mathbf{R}_{l''})$  háromszög-konfiguráció függvényei, háromtestpotenciálok.

A fenti perturbációs eredmények mögött valódi fizikai folyamatok állnak. A lineáris válasz során az  $\mathbf{R}_l$  helyen levő ion polarizálja a (kezdetben) homogén elektronfolyadékot. Ezért árnyékoló töltések gyűlnek fel  $\mathbf{R}_l$  körül, melyek erre vonzzák a másik,  $\mathbf{R}_{l'}$  helyen levő iont. Mindez ténylegesen az ion-párok közötti vonzóerőt jelenti, melyet az elektronfolyadék „közvetít”.

A háromtest-erők azért jelennek meg, mert tekintetbe kell vennünk: az  $\mathbf{R}_l$  helyen levő iont árnyékoló elektronfolyadék már eleve *nem homogén*, hiszen egy harmadik,  $\mathbf{R}_{l'}$  helyen levő ion már polarizálta, ezért az  $\mathbf{R}_l$  és  $\mathbf{R}_{l'}$  ionok között ható erő eleve függ ennek a harmadik,  $\mathbf{R}_{l'}$  helyen levő ionnak a helyzetétől, az  $(\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_{l'}, \mathbf{R}_{l''})$  háromszög alakjától. Hasonlóan érthetjük meg az  $E_{el}^{(4)}$  stb. tagokkal kapcsolatos négy-, illetve többtest-erők eredetét.

A többtest-erők vizsgálata, a magasabb rendű dielektromos függvények bonyolultsága ellenére, az utóbbi évek kutatásainak középpontjába került [3], [7]: ennek oka, hogy csupán párkölcsönhatások feltételezésével bizonyos fémeknek már a rács-szerkezete sem érthető meg, rezgési spektruma még kevésbé.

Végül megjegyezzük, hogy az energiának (4.28)-ban felírt sorfejtése, a lényegében szabad-elektron közelítésben meghatározott  $P$  polarizációs függvényekkel együtt, értelemszerűen használhatatlanná válik, ha a  $v$  potenciál a kötésben résztvevő elektronok valamilyen energianívójánál éles rezonanciaállapotot hozhat létre. Mivel ez az állapot inkább emlékeztet egy *kötött, atomi elektron* állapotára, mint a síkhulláméra, a perturbációs számítás *kiinduló közelítése* romlik el. Ez a helyzet az átmeneti fémek (Fe, Pd, Pt csoport), ezek között is elsősorban a VII B, VIII B oszlopokban levő elemek és a nemesfémek esetén. Ezekkel a fémekkel itt nem foglalkozunk.

#### 4.4. A fémek kompresszibilitása és rácsszerkezete

A szabályos kristály (2.12) teljes energiáját (4.28) alapján (3.15)-öt felhasználva kapjuk:

$$E_0 \approx \tilde{E}_0 = -\frac{Z^2 e^2}{2} \frac{M}{R_a} + E_{el}^{(0)} + \frac{3bZ^2}{4\pi R_a^3} + E_{el}^{(2)}(sz) + E_{el}^{(3)}(sz) + \dots \quad (4.48a)$$

Elhagytuk a zérusponti rezgések energiáját, mivel szerepük — kivételes esetektől eltekintve — a többi tag mellett nem jelentős; a szerkezeti elektronenergia járuléka:

$$E_{el}^{(2)}(sz) = -\frac{1}{2} \Omega_0 \sum_{\mathbf{G} \neq 0} |v(\mathbf{G})|^2 |s(\mathbf{G})|^2 \cdot \frac{G^2}{4\pi e^2} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{G})}\right), \quad (4.48b)$$

továbbá

$$E_{el}^{(3)}(sz) = \frac{1}{3} \Omega_0 \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2}^{(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 \neq 0)} v(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2)^* v(\mathbf{G}_1) v(\mathbf{G}_2) s(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2)^* s(\mathbf{G}_1) s(\mathbf{G}_2) \cdot \frac{(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2)^2}{4\pi e^3} \cdot \varepsilon_2^{-1}(\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2). \quad (4.48c)$$

(Az  $s(\mathbf{G})$  formafaktort (3.15)-ben definiáltuk.) Az elemi cella térfogatát és alakját (azaz rácsszerkezetét) *abszolút zérus* hőmérsékleten az szabja meg, hogy  $E_0$  minimális értéket vegyen fel.  $T \neq 0$  esetén, mint említettük, a *szabad energiát* minimálissá tevő szerkezet és térfogat alakul ki, a  $T=0$  esetre optimális viszonyok többé-kevésbé megváltoznak (hőtágulás, polimorf fázisátalakulás). Itt a  $T=0$  esetet kívánjuk vizsgálni.

Az előző fejezetben megmutattuk, hogy ha a  $M$  Madelung-állandót a „gömbi” 1,80 értékével közelítjük és csak (4.48a) első három tagját tekintjük, már birtokunkban van az energiának az a része, mely jó közelítésben meghatározza a fém atomi tér-



fogatát, sőt, kis valencia esetén kompresszibilitását is. Ha tehát a teljes energiát két részre bontjuk, egy „térfogati” és egy „szerkezeti” részre:

$$\tilde{E}_0 = \bar{E}_0(Z, R_a) + E(\text{sz}) \quad (4.49a)$$

$$\bar{E}_0(Z, R_a) = -\frac{Z^2 e^2}{2} \frac{1,80}{R_a} + E_{el}^{(0)} \left( \frac{R_a}{Z^{1/3}} \right) + \frac{3bZ^2}{4\pi R_a^3} \quad (4.49b)$$

$$E(\text{sz}) = \frac{Z^2 e^2}{2R_a} (1,80 - M) + E_{el}^{(2)}(\text{sz}) + E_{el}^{(3)}(\text{sz}) + \dots \quad (4.49c)$$

azt mondhatjuk, hogy a fém térfogatát a  $\left( \frac{d\bar{E}_0}{dR_a} \right) = 0$  feltétel már jó közelítésben szolgáltatja és  $E(\text{sz})$  térfogattól való függése — mint látni fogjuk —  $R_a$  kisebb korrekcióján kívül — csak a többvegyértékű fémek kompresszibilitásában jut komolyabb szerephez. Azt viszont, hogy egy adott  $R_a$  esetén milyen *rácsszerkezet* jön létre, kizárólag  $E(\text{sz})$  szabja meg, hiszen  $\bar{E}_0$  a rácsszerkezetre vonatkozó paramétert nem tartalmaz.

Mielőtt a szerkezeti energia részletes vizsgálatába bocsátkoznánk, megállapíthatjuk, hogy mivel a legtöbb fém nem a legnagyobb Madelung-állandóval rendelkező tércentrált köbös szerkezetet választja, sőt, sok fém szerkezete a köbösnél jóval alacsonyabb szimmetriájú, az elektronpolarizációs  $E_{el}^{(2)}$ ,  $E_{el}^{(3)}$  ... stb. tagok „a tapasztalat szerint” túlsúlyban vannak az elektrosztatikus szerkezeti energiához ( $E(\text{sz})$  első tagja) képest.

Azt is megállapíthatjuk, hogy  $E_{el}^{(n)}(\text{sz})/E_{el}^{(n-1)}(\text{sz}) \sim v(\mathbf{G})/E_F$ , ami a fémes sűrűségek és pszeudopotenciálok esetén  $\ll 1$ , tehát a (4.48a) sorfejtés általában jól konvergál.

Vizsgáljuk részletesebben  $E_{el}^{(2)}(\text{sz})$ -t. Mivel  $E_{el}^{(2)} < 0$ , továbbá  $v(q)$  atomi jellemző és  $\varepsilon$  egy adott térfogaton  $q$  meghatározott függvénye, világos, hogy  $E_{el}^{(2)}(\text{sz})$  értéke annál kisebb, minél „jobb” helyre esnek a  $q$ -térben a  $\mathbf{G}$  reciprokrács vektorok, azaz minél nagyobb *abszolút értékű*  $v(\mathbf{G})$  ordináta tartozik hozzájuk.

Tájékozódás céljából a pszeudopotenciálokat jól reprezentáló (4.16) Ashcroft-potenciált véve, Fourier-transzformációval nyerjük:

$$v(q) = -\frac{4\pi Ze^2}{\Omega_0 q^2} \cos(qR_c), \quad (4.50)$$

melynek alakját — a szerkezetmeghatározás szempontjából lényeges tartományban — a 6. ábra mutatja. Mivel az első, legrövidebb reciprokrács vektorok az első zérushely,  $q_0 = \pi/2R_c$  közelébe esnek, továbbá nagy argumentum ( $q \gg 2k_F$ ) esetén a  $G^2/4\pi e^2(1 - 1/\varepsilon(\mathbf{G}))$  „levágó” faktor miatt az  $E_{el}^{(2)}(\text{sz})$ -be adódó járulék lényegtelennek válik, csak a jelzett  $q$ -intervallum jelentős a szerkezet kialakulásában. A legrövidebb reciprokrács-vektora vonatkozó állítást illusztrálандó, a (3.19) képlet kapcsán láttuk, hogy lapcentrált köbös rácsban

$$G_{\min} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{3},$$

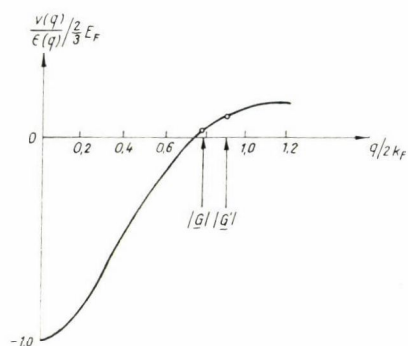
azaz

$$G_{\min} \sim 2,71(R_c/R_a) \cdot q_0.$$

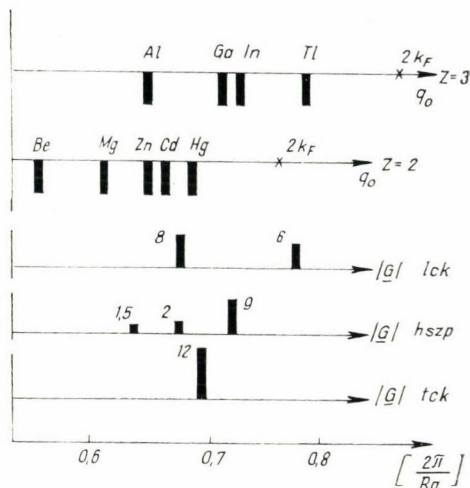


Mivel  $R_c/R_a \lesssim 1/2$  a legtöbb fém esetén (l. pl. a 2. táblázatot),  $G_{\min}$  tipikusan a 6. ábrán berajzolt helyre kerül.

A 7. ábra  $q_0$  és  $|G_i|$  relatív helyzetét mutatja 2 és 3 vegyértékű fémek esetén. A reciprokrács-vektorok helyét jelző vonalak hossza és az  $m$  számok azt jelzik,



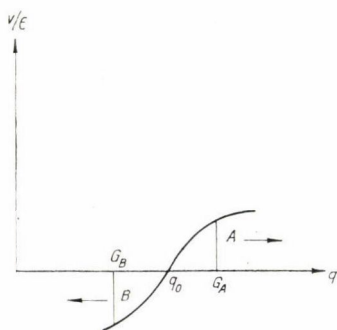
6. ábra. Ashcroft-potenciál (4.16) alumínium esetén,  $R_c=0,59 \text{ \AA}$  (Phys. Lett. 23, 48, 1966). A két legrövidebb reciprokrácsvektort nyilak jelzik.



7. ábra. A pseudopotenciál  $q_0$  zérushelye néhány két- és háromvegyértékű fém esetén, valamint a reciprokrácsvektorok helye és súlya lap- és tércentrált köbös, ill. hexagonális szoros pakolás esetén [4].

mekkora  $|v(G_i)|^2$  súlya a (4.48b) összegben, azaz  $m=|s(G_i)|^2 \cdot \tau$ , ahol  $\tau$  az ekvivalens (tükrözés, forgatás útján nyerhető, egyforma hosszúságú) vektorok száma.

A felső 2 egyenesen a  $q_0$  értékek mellett feltüntettük a  $2k_F=(9Z|4\pi^2)^{1/2} \cdot \frac{2\pi}{R_a}$



8. ábra. A másodrendű szerkezeti energia,  $E_{el}^{(2)}(sz)$  térfogatfüggésének sematikus magyarázata. Az energia  $G_A$  reciprokrácsvektorral kapcsolatos járuléka jelentősebbé válik, ha  $G_A$  a jelzett irányba tolik el, azaz ha a térfogat csökken.

értékeket is; az alsó 3 egyenesen a három leggyakoribb szerkezet súlyfaktorait látjuk.

Az első következtetéseket  $E_{el}^{(2)}(sz)$  térfogatfüggésére vonatkozóan vonhatjuk le. A 4.2 fejezet 2. táblázatára pillantva látjuk, hogy pl. Be, Mg, Cd, Al esetén az  $(\bar{E}_0(Z, R_a))$  alapján végzett becslés túl nagy egyensúlyi  $R_a$ -t adott. A 7. ábra szerint mind a hszp, mind a lck rács szoba jövő reciprokrácsvektorai  $q_0$ -tól jobbra esnek a fémek esetén, azaz a 8. ábrán sematikusán vázolt A/ eset áll elő.

Eszerint  $R_a$  csökkenésével  $E_{el}^{(2)}(sz)$  nagyobb negatív értékeket venne fel, mivel  $G_i$ -k a  $q_0$ -hoz képest jobbra, a nagyobb ordináták irányába tolnának el. Emiatt a szerkezeti energiából származó nyomásra

$$p_{el}^{(2)} = -\frac{dE_{el}^{(2)}(sz)}{d\Omega_0} < 0,$$

ami a

$$p_{el}^{(0)} + p_{ii} + p_{el}^{(1)} = - \left( \frac{d\bar{E}_0}{d\Omega_0} \right) = 0$$

által korábban meghatározott  $R'_a$  értéket *csökkenteni* igyekeznek. Hasonlóan talliumnál  $p_{el}^{(2)} > 0$  miatt a szerkezeti energia térfogatfüggése az első közelítés túl *kicsiny* atomsugarát *felfelé* korrigálja. A 7. ábra szerint gallium, indium és higany esetén a reciprokrácsvektorok mindhárom egyszerű szerkezet esetén szorosan közrefogják  $q_0$ -t. A kötési energia növelése így szükségképpen csak más, bonyolultabb szerkezet kialakítása útján lehetséges.

A másodrendű szerkezeti energia viszonylag gyenge térfogatfüggésének látványos szerep jut a kompresszibilitás meghatározásában. Ezt a 2. táblázat már sejtette a

### 3. TÁBLÁZAT

A szerkezeti energia térfogatfüggésének szerepe  $E_0$ ,  $R_a$  és  $B$  értékének meghatározásában. A modell-számítás [18] két paramétere a vegyérték, valamint az ion Pauling-rádiusza. Az (1) oszlop a szerkezeti energia nélküli első rendű, a (2) oszlop a  $E_{el}^{(2)}$ (sz)-t is tartalmazó számítás eredménye.

			$R_a$ [a.u.]			$-E_0/Z$ [ry]			$B \equiv 1/\chi$ [kbar]		
	Z	$R_p$ [a.u.]	(1)	(2)	kis.	(1)	(2)	kis.	(1)	(2)	kis.
Li	1	1,13	2,96	3,0	3,23	0,598	0,603	0,517	213	165	130
Na	1	1,80	4,07	3,94	3,93	0,462	0,461	0,459	67	61	76
K	1	2,51	5,28	4,89	4,88	0,370	0,383	0,388	26	29	37
Mg	2	1,23	3,20	3,33	3,34	0,953	0,981	0,886	694	233	369
Ca	2	1,87	4,38	3,94	4,12	0,729	0,765	0,728	176	136	152
Ba	2	2,55	5,64	4,51	4,66	0,583	0,647	0,627	68	162	103
Al	3	0,95	2,68	3,00	2,98	1,546	1,634	1,386	2340	715	771
Ga	3	1,17	3,10	3,30	3,15	1,366	1,434	1,472	1359	409	568
In	3	1,53	3,79	3,53	3,47	1,151	1,219	1,352	646	295	411
Tl	3	1,80	4,30	3,65	3,58	1,030	1,116	1,426	401	400	358
Sn	4	1,34	3,43	3,29	3,51	1,605	1,734	1,770	1624	684	579
Pb	4	1,59	3,91	3,37	3,65	1,430	1,566	1,813	986	755	459

többvegyértékű fémek kompresszibilitását alábecsülő elméleti értékeivel. A 3. táblázatban  $E_{el}^{(2)}$  szerepét vizsgáljuk  $R_a$  és  $1/\chi = B$  meghatározása szempontjából.

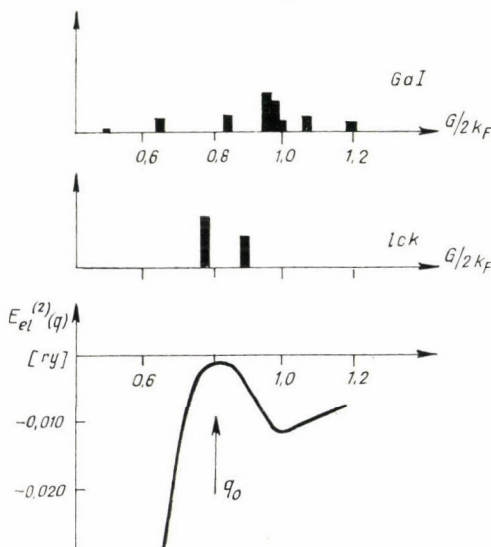
A potenciál-paramétereket ezúttal másként választottuk meg, mint a 2. táblázatban, itt az  $E_{el}^{(1)}$ -t meghatározó  $b$  állandót az  $R_p$  Pauling-ionrádiusz segítségével a

$$b = 2\pi e^2 R_p^2$$

alakban vettük fel, a (4.50)-ben szereplő  $R_c$ -re pedig az  $R_c = \text{konst} \cdot R_p$  feltevést tettük [18]. (Ez a potenciál nem (4.16) alakú függvény Fourier-transzformáltja; „hajlékonyabb” modell-potenciált választunk, melynek  $q_0$  zérushelye nem „köti meg” a  $b$  koordinátatérbeli átlag értékét.) A 3. táblázatból kitűnik, hogy az egyensúlyi *térfogat*, valamint az egy elektronra jutó teljes *energia* számításában  $E_{el}^{(2)}$  általában kis korrekciót jelent, az  $\bar{E}_0(Z, R_a)$ -ból meghatározott kompresszibilitások abszurdan nagy értékét viszont  $E_{el}^{(2)}$  az észlelt értékek tartományába csökkenti le, a korrekció itt jelentős. Megfigyelhető, hogy bár  $b$  különböző megválasztása miatt a 2. és 3. táblázatban  $\bar{E}_0$  közelítés pl. T1 esetén egyszer túl kicsiny, másszor túl nagy  $R_a$ -t jósol,  $E_{el}^{(2)}$  figyelembe vétele mindkét esetben a helyes irányban korrigál. A fenti alakú potenciál esetén ez törvényszerű: mivel (4.49b) alapján a  $(d\bar{E}_0/d\Omega=0)$ -ból kapható  $(R_c/R_a)$  az  $R_c$  monoton növvő függvénye, túl kis  $R_c$  választásával nemcsak  $R_a$  lesz túl kicsiny, de  $G_{\min} \sim \frac{1}{R_a}$  a  $q_0 \sim \frac{1}{R_c}$  bal oldalára kerül (8. ábra (B)), a másodrendű tag  $R_a$ -t növelni igyekszik.

Térjünk rá az adott térfogaton kialakuló atomi elrendeződés, a rácsszerkezet vizsgálatára.

E célból  $E_{el}$  (sz) „fő tagját”,  $E_{el}^{(2)}$  (sz)-t vizsgáljuk meg részletesen. Noha bizonyos esetekben a kialakuló rácsszerkezet magyarázatához ez még nem elegendő, a legtöbb esetben az észlelt szerkezetet  $V_{ii} + E_{el}^{(2)}$  minimuma közelében találjuk. Az elvet már ismerjük: olyan szerkezet fog megvalósulni, melyben a reciprokrács-vektorok — amennyire „tehetik”, — elkerülik  $q_0$ -t. Hogyan képzelhető ez el? A 7. ábra kapcsán említettük, hogy az ekvivalens, egymástól szimmetriaművelettel nyerhető  $\mathbf{G}$  vektorok járuléka  $E_{el}^{(2)}$  (sz)-ben egyforma, innen pl. a tércentrált köbös rács esetén a 12 súlyfaktor. (A  $\mathbf{G}_x = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, \pm 1, 0)$ ,  $\mathbf{G}_y = \frac{2\pi}{a}(\pm 1, 0, \pm 1)$ ,  $\mathbf{G}_z = \frac{2\pi}{a}(0, \pm 1, \pm 1)$



9. ábra. A szerkezeti energiát meghatározó  $\Phi(q)$  függvény gallium esetén [4].

vektorokról van szó.) Mi történik azonban, ha a kristályban az  $x, y$  tengelyek irányában nyújtás, a  $Z$  irányban összenyomás jön létre? A reciprokrács szimmetriája — az ionok rácsáéval együtt — köbösből tetragonálissá redukálódik és a  $\mathbf{G}_z$  vektorok *rövidebbeké* válnak, mint a  $\mathbf{G}_y$  és  $\mathbf{G}_x$  vektorok: a 7. ábrán a 12 súlyfaktor helyett kissé jobbra 8 és kissé balra 4 súllyal új reciprokrácsvektorok jelennek meg. Ez a „felhasadás” módot nyújt arra, hogy az esetleg „túlságosan”  $q_0$  közelébe eső  $\mathbf{G}$  vektorok miatt jelentéktelen szerkezeti energia negatív járuléka megnövekedjék (L. 11a ábra.) Más szóval:  $q_0$  közelébe eső  $\mathbf{G}$ -k esetén  $E_{el}^{(2)}$  igyekszik *torzított, szabálytalan szerkezetet* létrehozni, szemben az elektrosztatikus energia „szabályosat” kedvelő hatásával.



Nézzük a gallium példáját. Az  $E_{el}^{(2)}$ -ben szereplő

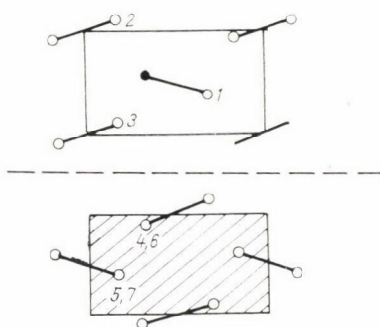
$$\Phi(q) = -\Omega_0 |v(q)|^2 \frac{q^2}{4\pi e^2} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon_q}\right) \quad (4.52)$$

függvény az észlelt  $\Omega_0$  mellett a 9. ábrán látható: Felül két skála mutatja a lényeges reciprokrácsvektorokat lapcentrált köbös rács, valamint az észlelt (10. ábra) GaI szerkezet esetén.

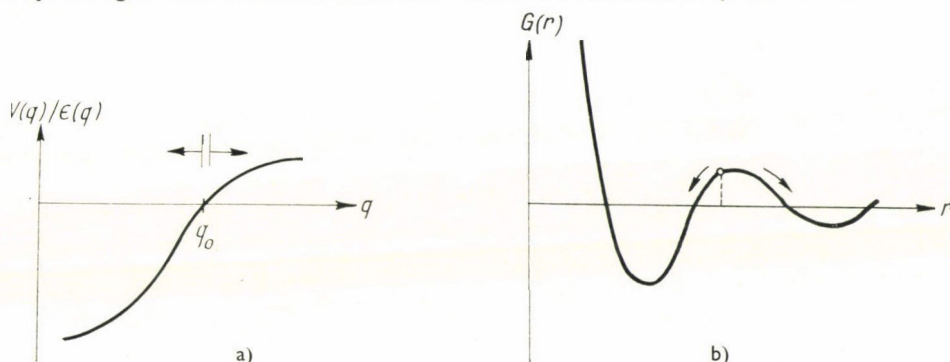
A GaI rácsban minden ionnak 7 közeli szomszédja van, egy egészen közel, 6 kissé távolabb. A szerkezet formálisan ortorombikus, az elemi cella 8 atomot számlál. A 9. ábra mutatja, hogy a reciprokrácsvektorok átrendeződése eredményeképpen  $E_{el}^{(2)}$  (sz) jelentősen megnövekszik, a lapcentrált — illetve a fel nem rajzolt egyéb szabályos — szerkezetekhez képest.

A konkrét számítások valóban igazolták, hogy a GaI fázisban az energia minimális, a felsorolt szabályos rácsokhoz képest.

A reciprokrácsvektorok átrendeződése persze matematikai konstrukció, a valóságban az *ionok rácsa* torzul el. Ennek oka a koordináta-térben is szépen szemléltethető. Írjuk  $E_{el}^{(2)}$ -t a (4.43) alakban és tüntessük fel az (5. ábrán alumínium esetén felrajzolt)  $G(r)$  párkölcsönhatási függvény rajzán a legközelebbi szomszédok helyét. A gallium esetén a 11b ábrán sematikusán ábrázolt helyzet alakul ki.



10. ábra. Gallium ion (feketített kör) és hét legközelebbi szomszédja. A vonalkázott sík az előbbi alatt, illetve felett foglal helyet. A GaI szerkezet normális nyomáson,  $T=0^\circ$ -on stabilis [4].



11. ábra. Kevésbé szimmetrikus rács szerkezet kialakulásának sematikus magyarázata a hullámszámvektorok terében („ $q_0$ -elv”, a) ábra), valamint a koordinátatérben az effektív ion-ion potenciál alapján (b) ábra). Szabályos (lck, tck stb.) szerkezet esetén a térfogati erők által meghatározott átlagos iontávolság mellett a legközelebbi szomszédok távolsága úgy alakulhat, hogy éppen a potenciál maximumához közel esik (gallium), így az alacsonyabb szimmetriájú szerkezet előnyösebb [4].

Mivel a kristály térfogatát az „erősebb” térfogati energia rögzíti, adott  $v$  és  $k_F$  mellett az energia akkor lesz minimális, ha a szomszédok — és elsősorban a legközelebbi szomszédok — a potenciálvölgybe esnek. Erre a szokásos szabályos elrendeződések mellett vagy van mód, vagy nincs, — gondoljuk meg, hogy adott  $\Omega_0$  mellett a legközelebbi szomszédok távolsága egyértelműen rögzített. A közelebbi

vizsgálat azt mutatja, hogy éppen Ga, In, Hg esetén, tehát ahol az előbbi „reciprok-rács” leírásban  $G_i$ -k a  $q_0$ -t közrefogják — a legközelebbi szomszédok minden egyszerű szerkezet esetén a „hegy” tetejére esnek. Érdekes tehát néhány szomszédnak közelebb, másoknak távolabb „húzódni”, — még akkor is, ha a szerkezet nagybani torzulása miatt  $M$  értéke lecsökken, tehát elektrosztatikusan bizonyos „energia-befektetésre” van szükség.

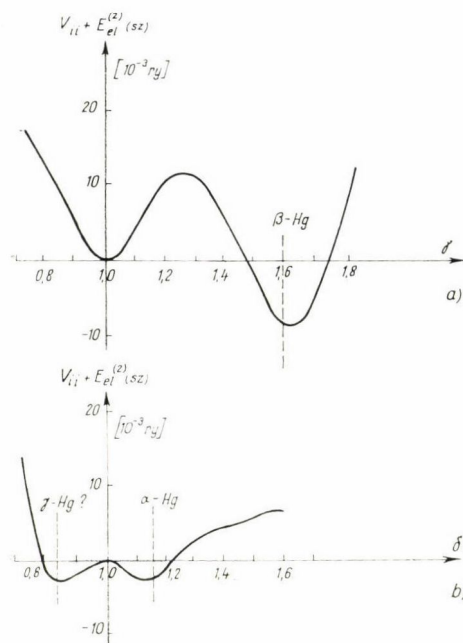
A 12. ábrán a Hg kristályszerkezetére vonatkozó számításokat látjuk: a lapcentrált köbös rács tetragonális (a) és romboédes (b) torzításával keletkező szerkezet energiáját mérték fel a deformáció paraméterének függvényében. Látjuk, hogy a szabályos lapcentrált rács a romboédes deformációra lokálisan is instabil; a két természetben megvalósuló  $\alpha$ -Hg és  $\beta$ -Hg szerkezetek a számolt minimum közelébe esnek. Az (111) reciprok-rácsvektorok, mint a 7. ábra mutatja, éppen  $q_0$ -ra esnek, így a romboédes deformáció oka közvetlenül, minden számítás nélkül is világos. A  $\gamma$ -Hg fázis szerkezete még nem ismert, gyanítható, hogy éppen a b) ábrán jelzett elméleti minimumnak felel meg. Hasonlóan választhatunk arra a kérdésre, hogy miért tér el a szoros hexagonális illeszkedésben kristályosodó fémek illeszkedése az „ideálisan szoros” illeszkedéstől. A hexagonális síkok egymástól mért távolsága és a síkon belüli atomtávolság ideális, legszorosabb térkitöltés melletti aránya

$$c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633.$$
 Noha a Madelung állandó közel ezen értéknél,  $c/a \sim 1,636$  esetén a legnagyobb (e rács inverziós szimmetriájának hiánya miatt nem éppen  $\sqrt{8/3}$ -nál!), cink esetén az észlelt arány értéke 1,86! Az elmélet kvantitatív teljesítőképességének

illusztrálására a Ga példáján túl — a 13. ábrán a Mg-Cd ötvözetek  $c/a$  értékének számolt és észlelt értékeit mutatjuk be a magnézium százalékos arányának függvényében.

Az ilyen típusú ötvözetek esetén egyszerűen általánosított [4] számolás láthatóan jól jelzi a tendenciát, az egyezés jónak mondható.

Érdekes tény, hogy a vizsgált „szabálytalan szerkezetű” fémek olvadt állapotban is hasonlóan bonyolult rövidtávú rendet mutatnak. Ez a 11b ábra alapján egyébként várható is, ha tekintetbe vesszük, hogy olvadáskor az egy ionra jutó térfogat alig változik!



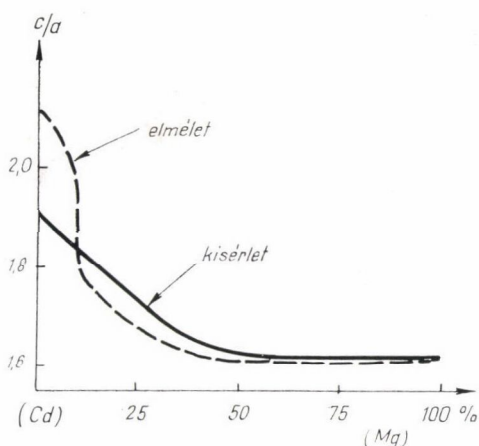
12. ábra. Higanyszervezetfüggő (elektrosztatikus + polarizációs) energiája lapcentrált köbös deformációja esetén [4]. Tetragonális deformációnál (a) a minimum a tengelyarány ( $\gamma$ ) tapasztalati értékéhez közel esik. Hasonló a helyzet a romboédes deformáció (b)  $\delta$  paraméterének függvényében: ez az  $\alpha$ -Hg szerkezetre ad magyarázatot. Feltételezhetően a másik minimum a még pontosan nem meghatározott  $\gamma$ -Hg szerkezetnek felel meg. Érdekes a lck rács lokális instabilitása a b) ábrán.



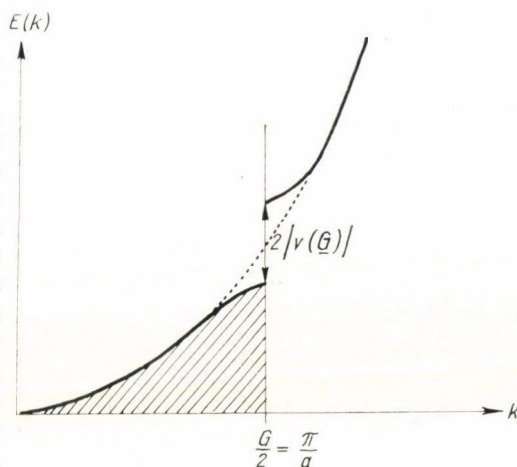
Az elmondottak azt igazolják, hogy a fém teljes energiájára nyert (4.48) képletek alapvetően helyesen írják le a fémek térfogati és szerkezeti tulajdonságait egyaránt. Eszerint — az átmeneti és nemes fémeket kivéve — a tiszta fémek és ötvözetek tökéletesebb leírásának útja a pszeudopotenciál alakjának alaposabb ismeretén, valamint  $E_{el}$  magasabb rendű tagjainak figyelembevételén múlik.

Mielőtt rátérnénk a fémek rácsdinamikájának kérdéseire, vessünk egy pillantást a fémek szerkezetek elméletében régóta ismert elvre, a Hume—Rothery szabályra. Ez lényegében empirikus összefüggés, mely egész sor ötvözet szerkezete és az iononkénti elektronszám korrelációját állapítja meg. Szokásos magyarázata azon alapul, hogy a fém hozzáférhető energiasávjait „tiltott” sávok választják el egymástól, a a periodikus potenciál közel szimmetrikusan tolja  $|\nu(\mathbf{G})|$ -vel arányosan) magasabb és alacsonyabb energiaértékek felé a (4.3)-ban szereplő szabad elektronok energianívóit. Így telt sáv esetén az egy elektronra jutó energia optimálisan kicsiny, például a félig telt sáv esetéhez viszonyítva (14. ábra). Az alsó sáv állapotai ezen az egydimenziós esetet ábrázoló rajzon láthatóan akkor vannak betöltve, ha a legmagasabban betöltött hullámszám,  $k_F$  éppen  $G/2$ -vel egyenlő, azaz  $|\mathbf{G}| = 2k_F$ . Perierls mutatott rá először, hogy egydimenziós esetben *szükségszerűen* ez az állapot áll elő, azaz *egy dimenzióban fém nem lehetséges*, mivel a kristály

ionjai úgy mozdulnak el, pl. kétszerte nagyobb elemi cellájú, kétatomos rácsot képezve, hogy  $|\mathbf{G}|$  éppen az (elektronsűrűségtől függő)  $2k_F$  értéket vegye fel. Minthogy kísérleti tapasztalat, hogy igen sok kétkomponensű ötvözet egyazon — esetleg roppant bonyolult — szerkezetben kristályosodik, az összetétel függvényében pedig mindegyik egy másik, hasonlóan bonyolult szerkezetbe megy át, és a kialakuló *szerkezet* egyértelműen az *elektronsűrűséggel* függ össze, Hume—Rothery azt a következtetést vonta le, hogy a fenti elv három dimenzióban is érvényesülhet: a kialakuló szerkezet „igyekszik” olyan lenni, hogy a Fermi gömb  $2k_F$  átmérője egyenlő legyen egy (vagy több) reciprokrácsvektorral. Ez a szabály az általunk ismertetett elméletből *nem* nyilván-



13. ábra. A  $c/a$  arány változása Mg-Cd ötvözetben (Weaire, J. Phys. C. 1. 210, 1968), másodrendű szerkezeti energia figyelembevételével.



14. ábra. Közel szabad elektronok esetén, egy dimenzióban, telt sáv esetén minimális az egy elektrónra jutó teljes energia.



való. Bár a  $P_0(q)$  függvény  $2k_F$ -nél divergens *deriválttal* rendelkezik,  $P_0$  maga semmiképpen sem lesz divergens, semmiféle minimummal nem rendelkezik ezen a helyen. (A  $P_0$  függvény „egydimenziós” megfelelője az *egydimenziós*  $E_{el}^{(2)}$ -t valóban divergensessé teszi.) Bár úgy látszik, több esetben a Hume—Rothery szabályok kapcsolatba hozhatók  $P_0$  logaritmikus szingularitásával, ill. a függvény  $2k_F$ -nél történő gyors változásával [10], a kérdés nem tekinthető tisztázottnak.

#### 4.5. Rugalmas állandók és rácsrezgések

Az egydimenziós Peierls-instabilitás mindenesetre óvatosságra int: ha egy meghatározott rácsszerkezet energetikailag kedvezőbb is több más, kiválasztott rácsszerkezethöz egy adott fém esetén, mindaddig nem jósolhatjuk az illető szerkezet megvalósulását, amíg meg nem győződünk arról, hogy *semmiféle* rács-deformációval nem tudtuk az energiát tovább csökkenteni. A megvizsgálandó deformációk közé kell sorolnunk a homogén, illetőleg a véges hullámhosszúságú rácsdeformációkat egyaránt. Ha ki tudjuk számítani az összes rácsrezgések frekvenciáját és valamennyit valósnak találjuk, ez a rács stabilitásának elegendő kritériuma.

Bár az előbbieken vázolt elmélet lehetővé teszi a fononfrekvenciák kiszámítását is, a rugalmas állandók meghatározására a hosszúhullámú rácsrezgések vizsgálatán kívül egy *közvetlen* út is kínálkozik. Alkalmazzunk ugyanis egy homogén deformációt a vizsgált rácsszerkezetre; az infinitezimális deformáció jellemzésére a szokott módon az  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  paramétereket használva [11] az energia megváltozása egyszerűen térfogatban másodrendben

$$W = \frac{\delta E_0}{\Omega_0} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta = x, y, z} c_{\alpha\beta, \gamma\delta} \cdot \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta} \quad (4.53)$$

alakú (a feltételezett egyensúlyban mindenesetre  $\frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} = 0$ ). Köbös kristály esetén mindössze 3 különböző  $c$  rugalmas állandó van:  $c_{11} = c_{xxxx}$ ,  $c_{12} = c_{xxyy}$  és  $c_{44} = c_{xyxy}$  és így

$$W = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \{c_{11} \cdot \varepsilon_{\alpha\alpha}^2 \delta_{\alpha\beta} + c_{12} \varepsilon_{\alpha\alpha} \varepsilon_{\beta\beta} (1 - \delta_{\alpha\beta}) + c_{44} \varepsilon_{\alpha\beta}^2 (1 - \delta_{\alpha\beta})\}. \quad (4.54)$$

Elegendő tehát az  $E_0(\varepsilon)$  függvényt meghatározni és innen deriválással kapjuk a rugalmas állandókat.  $E_0(\varepsilon)$  azonban az eddigiek, (3.18), (4.48) alapján tetszőleges *véges*  $\varepsilon_{\alpha\beta}$ -re kiszámítható, minthogy az  $\varepsilon$  paraméterű deformáció *homogén*, tehát a *deformált* kristály is *tökéletes* (eltolásra szimmetrikus), csupán más, általában alacsonyabb forgási, tükrözési szimmetriával rendelkezik. Köbös kristály tetragonális (véges!) deformációjánál pl. a deformált  $R'_i$  rácsvektorok komponenseire

$$X'_i = X_i/(1 + \varepsilon/2); \quad Y'_i = Y_i/(1 + \varepsilon/2); \quad Z'_i = Z_i(1 + \varepsilon/2)^2, \quad (4.55a)$$

tehát a reciprok rácsban

$$G'_x = G_x(1 + \varepsilon/2); \quad G'_y = G_y(1 + \varepsilon/2); \quad G'_z = G_z/(1 + \varepsilon/2)^2. \quad (4.55b)$$

A zérustól különböző (infinitezimális)  $\varepsilon_{\alpha\beta}$ -ok ez esetben:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = -\varepsilon/2; \quad \varepsilon_{zz} = \varepsilon; \quad (4.55c)$$

A tetragonális deformáció  $C'$  nyírási modulusa tehát a

$$C' = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} = \frac{1}{3\Omega_0} \left\{ \frac{d^2 E_0}{d\tilde{\epsilon}^2} \right\}_{\tilde{\epsilon}=0} \quad (4.56)$$

képlet alapján határozható meg; hasonlóan a romboéderes deformáció (nyírás a kocka élei mentén)  $\delta$  paramétere szerinti második derivált adja a  $c_{44}$  állandót.

A rugalmas állandók további kombinációjával kapcsolatos a minden irányban egyenletes összenyomás:  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \tilde{\epsilon}/3$  az  $\tilde{\epsilon} = \delta\Omega_0/\Omega_0$  értékű (infinitezimális) térfogatváltozást jelenti, azaz

$$\Omega_0 \left( \frac{d^2 E_0}{d\Omega_0^2} \right) = B = \frac{d^2 W}{d\tilde{\epsilon}^2} = \frac{c_{11} + 2c_{12}}{3}, \quad (4.57)$$

ahol a  $\kappa$  kompresszibilitás reciprokát, a térfogati modulus  $B$ -vel jelöltük.

A köbös kristály stabilitásának szükséges feltétele természetesen, hogy

$$c_{11} - c_{12} > 0; \quad c_{44} > 0; \quad B > 0$$

fennálljon.

A teljes energia (4.48) kifejezése alapján a rugalmas állandók is

$$C_{ij} = (c_{ij})_{ii} + (c_{ij})_{el}^{(0)} + (c_{ij})_{el}^{(1)} + (c_{ij})_{el}^{(2)} + \dots \quad (4.58)$$

sor alakjában adódnak, ahol az egyes tagok a megfelelő energijárulékok (4.56—57) típusú deriváltjai. A  $C'$  és  $C_{44}$  nyírási modulusok esetén a térfogattól függő  $E_{el}^{(0)}$  és  $E_{el}^{(1)}$  nem ad járulékot és így

$$C' = (C')_{ii} + (C')_{el}^{(2)} + \dots; \quad c_{44} = (c_{44})_{ii} + (c_{44})_{el}^{(2)} + \dots \quad (4.59)$$

Példaként a  $C'$  járulék a (4.52)-beni  $\Phi$  segítségével a (4.55—56) képletek alapján:

$$(C')_{el}^{(2)} = \frac{1}{4\Omega_0} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left\{ G_x^2 \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q_x^2} \right)_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} - 2G_x G_y \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q_x \partial q_y} \right)_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} + G_y^2 \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q_y^2} \right)_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} \right\}. \quad (4.60)$$

A  $(c_{ij})_{ii}$  járulékok számítása kissé körülményesebb, a direkt rácsvektorokra vett összeg deriválása miatt, viszont az eredmény

$$(c_{ij})_{ii} = \frac{M_{ij}(\text{sz})}{R_a^4} \cdot \frac{Z^2 e^2}{2} \quad (4.61)$$

alakjában adódik, ahol az  $M_{ij}$  állandók már csak a szerkezetre (pl. a  $c/a$  arányra) jellemzők és egyszersmindenkorra táblázatba foglalhatók.

Sok esetben már a számítások részletes elvégzése nélkül is következtethetünk a rugalmas állandók értékére. Például megérthetjük, miért anomálishan kicsiny a  $c_{44}$  állandó értéke Al fémben. Alumínium esetén  $c_{44}$ -et ( $2,8 \cdot 10^{11}$  erg/cm<sup>3</sup>) elsősorban nem a  $c_{11}$  ( $10,8 \cdot 10^{11}$ ) és  $c_{12}$  ( $7,8 \cdot 10^{11}$ )-hez viszonyítva érezzük kicsinynek, hanem az elektrosztatikus járulék  $(c_{44})_{ii} = 17,2 \cdot 10^{11}$  erg/cm<sup>3</sup> értékéhez viszonyítva. Az elektron-polarizációs tagok a Madelung-energia „ellen” dolgoznak, és pedig igen eredményesen! Ennek oka a „ $q$ -elv” alapján kézenfekvő: a 7. ábrán is látható, hogy a  $\frac{2\pi}{a}$  (1, 1, 1) reciprokrács-vektorok igen közel fekszenek  $q_0$ -hoz, tehát egy ezeket

„szétválasztó” romboéderes deformáció igen előnyösnek látszik. Ez ugyan nem jön létre, éppen a Madelung-energia szimmetriát kedvelő hatása miatt, de a  $c_{44} > 0$  feltevél „éppen hogy” teljesül.

Igen érdekes a fémek ón esete. Kimutatható [7], hogy a nyírási modulusok (4.60) sorában a másodrendű elektron-polarizációs tagok és a Madelung-járulék között olymértékű a kompenzáció, hogy a sor további tagjai nagyobbak, mint az észlelt  $c_{\alpha\beta}$ ! Bár a sorfejtés konvergens, az erős kompenzáció mellett a harmad- negyedrangú tagok járuléka ebben az esetben a *végegyedményben* igen jelentős. Hasonló a helyzet a hexagonális szerkezetű kétvegyértékű Mg esetén is [3].

Minthogy  $\mathbf{D}(\mathbf{q}) = \mathbf{D}_i(\mathbf{q}) + \mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})$  első tagját (3.29)-ben meghatároztuk, a rácsrezgések frekvenciájának kiszámításához  $\mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})$  ismeretére van még szükség.

A rugalmas állandók esetéhez hasonlóan (4.28) alapján

$$\mathbf{D}_{el}(\mathbf{q}) = \mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})^{(2)} + \mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})^{(3)} + \dots, \quad (4.62)$$

ahol  $\mathbf{D}_{el}^{(n)}$  az elektronpolarizációs sor  $n$ -edik tagjából,  $\mathbf{D}_{el}^{(n)}$ -ből származik. Az egyszerűség kedvéért Bravais-rácsra szorítkozva, a másodrendű tagból adódó párkölcsönhatás-részt a (2.14) definícióból a

$$\mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{1}{M} \sum_{m'} \left[ \frac{\partial^2 (N \cdot \mathbf{E}_{el}^{(2)})}{\partial R_{m,\alpha} \partial R_{m',\beta}} \right]_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^0} \cdot e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m^0 - \mathbf{R}_{m'}^0)}$$

képlet adja, ahonnan (4.28) segítségével

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})_{\alpha\beta}^{(2)} &= \frac{1}{2NM} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{m'} \Phi(\mathbf{k}) k_\alpha k_\beta [e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m^0 - \mathbf{R}_{m'}^0)} + c \cdot c] \cdot e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_m^0 - \mathbf{R}_{m'}^0)} - \\ &\quad - \frac{1}{NM} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{m'} k_\alpha k_\beta \Phi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m^0 - \mathbf{R}_{m'}^0)}. \end{aligned}$$

A  $\Phi$  függvény (4.42) által adott. Az  $m'$  szerinti összegezés a  $\mathbf{k} = \pm(\mathbf{q} + \mathbf{G})$  értékek esetén ad zérustól különböző eredményt, tehát

$$\mathbf{D}_{el}(\mathbf{q})_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{G}}^{(\mathbf{q} + \mathbf{G} \neq 0)} (\mathbf{q} + \mathbf{G})_\alpha (\mathbf{q} + \mathbf{G})_\beta \Phi(|\mathbf{q} + \mathbf{G}|) - \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} G_\alpha G_\beta \Phi(|\mathbf{G}|). \quad (4.63)$$

Ezután (2.17) és (3.29) alapján  $\mathbf{D}(\mathbf{q})$ -ra nyerjük:

$$\begin{aligned} D(\mathbf{q})_{\alpha\beta} &= \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{G}}^{(\mathbf{q} + \mathbf{G} \neq 0)} (\mathbf{q} + \mathbf{G})_\alpha (\mathbf{q} + \mathbf{G})_\beta \cdot \varphi_\eta(\mathbf{q} + \mathbf{G}) - \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} G_\alpha G_\beta \Phi_\eta(\mathbf{G}) + \\ &\quad + \frac{Z^2 e^2}{M} \sum_{l \neq 0} N_{\alpha\beta}(\eta; \mathbf{R}_l^0) (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l^0} - 1) + \mathbf{D}_{el}^{(3)}(\mathbf{q})_{\alpha\beta} + \dots, \end{aligned} \quad (4.64)$$

ahol

$$\varphi_\eta(\mathbf{q}) = \Phi(\mathbf{q}) + \frac{4\pi Z^2 e^2}{\Omega_0 q^2} e^{-q^2/4\eta^2}. \quad (4.65)$$

A másodrendű  $\mathbf{D}_{el}^{(2)}$  járulék alapvetően megváltoztatja azt a rácsrezgési spektrumot, amely (3.29)-ből adódik és amelyet a 3.2 fejezetben részletesen vizsgáltunk. Az ion-rács dinamikai matrixáról láttuk, hogy a hosszú hullámú határesetben nem rugalmas



közeg rezgéseit írja le: a longitudinális hullámok frekvenciája *nem* csökken a hullámhosszal fordítottan arányosan, hanem állandó értékhez, a sűrűség által meghatározott plazmafrekvenciához tart. Ennek okaként megállapítottuk, hogy az ionok között ható Coulomb-erők hosszú hatótávolsága teszi a  $\mathbf{D}_i$  matrixot  $\mathbf{q}=0$ -nál szingulárisrá és ez vezet a plazmarezgések fellépésére. Fizikai szempontból világos, hogy az elektronok mozgása következtében létrejövő árnyékolás az ionok közötti erők hatótávolságát csökkenti. Ezt a (4.46)-ban felírt  $G(r)$  effektív ion-ion potenciál  $1/r$ -nél gyorsabb (4.41) lecsengése expliciten mutatja. Ez viszont már elegendő is ahhoz, hogy a longitudinális rezgések a hosszuhullámú határesetben hangrezgésekké váljanak. Ezt a (4.64) képlet kis  $\mathbf{q}$ -ra vett viselkedéséből láthatjuk. Mivel  $\mathbf{D}(0)=0$  és a  $q_\alpha$ -ban lineáris tagok a reciprok rács tükrözési szimmetriája miatt eltűnnek,

$$D(\mathbf{q})_{\alpha\beta} \sim \frac{1}{M} q_\alpha q_\beta \varphi_\eta(0) + \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \left\{ q_\alpha q_\beta \varphi_\eta(\mathbf{G}) + (q_\alpha G_\beta + q_\beta G_\alpha) \left( \frac{\partial \varphi}{\partial q_\lambda} \right)_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} \cdot q_\lambda + \frac{1}{2!} G_\alpha G_\beta q_\lambda q_\mu \cdot \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q_\lambda \partial q_\mu} \right)_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} \right\} + O(q^3), \quad (4.66)$$

ahol elhagytuk a direkt-rács összeget ( $\eta$  elegendő nagyra van választva), a  $\lambda, \mu$  indexekre összegezni kell, továbbá

$$\varphi_\eta(0) = \lim_{q \rightarrow 0} \varphi_\eta(q).$$

Mivel (4.13) alapján a pszeudopotenciál Fourier-transzformáltja  $\mathbf{q}=0$  közelében  $bZ/\Omega_0$ -al különbözik a Coulomb-potenciáltól,

$$v(q) \sim \left( -\frac{4\pi Ze^2}{\Omega_0 q^2} + \frac{bZ}{\Omega_0} \right) + O(q^2). \quad (4.67)$$

Az  $1/q^2$  tag  $q^2 \cdot |v_q|^2$ -ben a Coulomb-taggal együtt kiesik és kapjuk:

$$\varphi_\eta(0) = \varphi_\infty(0) - \pi Z^2 e^2 / \Omega_0 \eta^2,$$

ahol

$$\begin{aligned} \varphi_\infty(0) &= \lim_{q \rightarrow 0} \left\{ -\Omega_0 |v_q|^2 \frac{q^2}{4\pi e^2 \varepsilon_q} + \frac{2bZ^2}{\Omega_0} \right\} = \\ &= \frac{2bZ^2}{\Omega_0} + \lim_{q \rightarrow 0} \left\{ \frac{4\pi Z^2 e^2}{\Omega_0 q^2 \varepsilon(q)} \right\}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

A  $b$ -vel arányos tag mellett tehát *nem* a Coulomb-potenciál, hanem az  $\varepsilon$  diektromos állandóval árnyékolt Coulomb-potenciál Fourier-komponense jelenik meg, ami nem szinguláris, hiszen  $\varphi_\infty(0)$  miatt

$$\varphi_\infty(0) = \frac{2bZ^2}{\Omega_0} + \frac{Z^2}{\Omega_0 \tilde{P}(0)} = \frac{2bZ^2}{\Omega_0} + \frac{mZ}{3} v_F^2 \left( \frac{P_0(0)}{\tilde{P}(0)} \right), \quad (4.69)$$

ahol  $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$  a Fermi-energiájú elektronok sebessége. A  $\mathbf{D}$  matrix elemei tehát, szemben  $\mathbf{D}_i$ -vel,  $\mathbf{q}$  komponensei szerint hatványsorba fejthetők, így a frekvenciák elegendően nagy hullámhosszak esetén a  $q=2\pi/\lambda$  hullámszámmal arányosakká válnak: a rezgések a kontinuum hangrezgéiseibe mennek át.

Ha az  $x, y, z$  tengelyeket a köbös kristály tengelyeinek irányában vesszük fel,  $D(\mathbf{q})$  diagonális lesz a  $\mathbf{q} = (0, 0, q)$  vektoroknál és  $D_{zz}$  éppen a longitudinális frekvencia négyzetével egyenlő, tehát a (001) irányú *longitudinális* hang sebessége (4.65–69) alapján

$$C_{\text{long}}^2 = \lim_{q \rightarrow 0} \left( \frac{\omega_{\text{long}}}{q} \right)^2 = \lim_{q \rightarrow 0} \left( \frac{1}{q^2} D_{zz}(\mathbf{q}) \right) = \frac{2bZ^2}{M\Omega_0} + \frac{mZ}{3M} v_F^2 \left( \frac{P_0(0)}{\bar{P}(0)} \right) + \frac{1}{M} \left[ \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \left\{ \varphi_{\eta}(\mathbf{G}) + 2G_x \left( \frac{\partial \varphi}{\partial q_x} \right) + \frac{1}{2} G_x^2 \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q_x^2} \right) \right\} - \frac{\pi Z^2 e^2}{\Omega_0 \eta^2} \right]. \quad (4.70)$$

(A [ ]-ben levő kifejezés — mint (3.9) — nagy  $\eta$ -kra független  $\eta$ -tól,  $e^{-\eta^2 R_a^2}$  rendű elhanyagolásokkal.) Ha a  $\mathbf{G}$ -re vett összegzés nem volna (diszkrét rács helyett kontinuum esete),  $b=0$  esetén az ún. Bohm—Staver képlethez jutunk:

$$C_{\text{long}}(B-S) = \sqrt{\frac{mZ}{3M}} \cdot v_F \quad (b=0, G \rightarrow \infty) \quad (\bar{P} = P_0). \quad (4.71)$$

Ez a képlet azonban — azon túl, hogy az adiabatikus közelítést utólagosan igazolja — csak nagyságrendileg helyes, mivel a  $b$ -vel arányos tag járuléka általában a legnagyobb. (Ez utóbbiról egyébként (4.17) alapján könnyen belátható, hogy ugyancsak  $\sim \frac{m}{M} v_F^2$  nagyságrendű.)

A most tárgyalt módszer: a dinamikai probléma kis  $\mathbf{q}$ -ra, azaz hosszú hullámok esetére való megoldása a hangsebességek értékén keresztül a második lehetőséget adja a rugalmas állandók meghatározására, hiszen például

$$C_{\text{long}}(001) = \sqrt{\frac{c_{11}\Omega_0}{M}}, \quad C_{tr}(110) = \sqrt{\frac{C' \cdot \Omega_0}{M}}, \quad C_{tr}(001) = \sqrt{\frac{c_{44}\Omega_0}{M}}, \quad (4.72)$$

ahol a longitudinális, illetve transzverzális hangsebességek argumentumként  $\mathbf{q}$  irányát tüntették fel.

Minthogy a rugalmas állandók meghatározására a fejezet elején ismertetett homogén deformációk módszere is alkalmas, azt várjuk, hogy a kétféle módszerrel nyert eredmények összhangban lesznek. Izgalmas kérdés, hogyan adódik valóban egyenlőnek például a kétféle módon számolt  $B$  térfogati modulus, amikor a homogén összenyomás esetén a homogén elektronfolyadék  $B_{el}^{(0)}$  modulusa *összeadandóként* jelenik meg és a válaszfüggvényt tartalmazó tagban az elektronsűrűség változását is tekintetbe vesszük, míg a hosszú hullámok módszerében az elektronok sűrűsége, amely a válaszfüggvény argumentumában szerepel, állandónak van tekintve. Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy a  $C'$  (és  $C_{44}$ ) állandókra a (4.56) eredmény és a (4.70) hosszú hullámú sorfejtések a  $v_q$  hatványai szerint perturbációs sor másodrendjében megegyeznek. Probléma csak a  $B$  modulus esetén van: mindkét esetben  $|v_q|^2$ -ig számolva a két eredmény *különbözik* egymástól. Először is a (4.57) definíció alapján (4.48a) tagjait deriválva másodrendben

$$B = B_{el}^{(0)} + B_{el}^{(1)} + B_{el}^{(2)} + B_{ii} = \frac{1}{\kappa_h} + \frac{2bZ^2}{\Omega_0^2} + \Omega_0 \frac{d^2 E^{(2)}}{d\Omega_0^2} + B_{ii} \quad (4.73)$$



járulékok adódnak. A hosszú hullámok módszeréből

$$B = c_{11} - \frac{4}{3} C'$$

alapján, felhasználva (4.72), (4.70) és (4.69)-et, valamint  $C'$  (4.60) alakját, a (4.73)-bani két első térfogatfüggő tagot a (4.69)-ben szereplő térfogatfüggő tagokkal (pontosan  $\varphi_\infty(0)/\Omega_0$ -al), kell azonosítanunk:

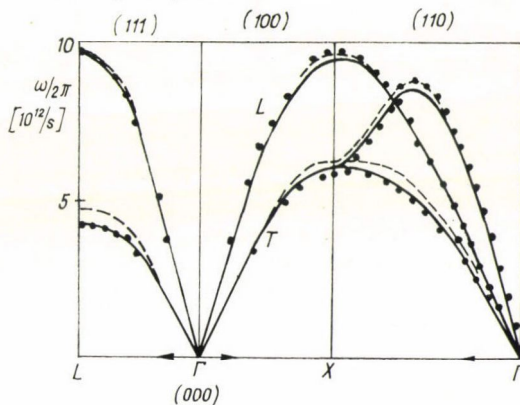
$$B_{el}^{(0)} + B_{el}^{(1)} = \frac{1}{\Omega_0} \varphi_\infty(0),$$

azaz fenn kell állnia a

$$\Omega_0 \frac{d^2 E_{el}^{(0)}}{d\Omega_0^2} = \frac{Z^2}{\Omega_0^2} \frac{1}{\bar{P}(0)}$$

összefüggésnek. Ez viszont éppen az elektronfolyadék kompresszibilitása és polarizációs függvénye közötti (4.38) *egzakt* összefüggés, ami a (4.39)-ben definiált  $\bar{P}$ -ra teljesül.\* Továbbmenve, a  $D_{el}^{(2)}$ -ből adódó ( $\mathbf{G} \neq 0$ ) reciprokrács-összegek vizsgálatából az derül ki, hogy a (4.73) homogén deformációs módszerben nemcsak a (4.70)-ben fellépő tagok jelennek meg, hanem ezen kívül *további* járulékok is, melyek konkrétan a (4.48b) kifejezésben az  $\varepsilon(q; k_F)$  függvény explicit elektronsűrűségtől (azaz  $k_F$ -től) való függéséből származnak.

A „kétféle térfogati modulus” problémája évekig foglalkoztatta a kutatókat, a magyarázat *Brovman* és *Kagan* nevéhez fűződik [12]. Eszerint a hosszú hullámok módszere és a homogén deformációk módszere ekvivalensek, csupán az nem igaz, hogy a (4.28) szerinti sorfejtésben, azaz  $v_q$ -ban *azonos rendben* adják ugyanazt az eredményt. Az  $\varepsilon(q)$ -ban szereplő  $k_F$  Fermi-hullámszámot a longitudinális rácsrezgések,

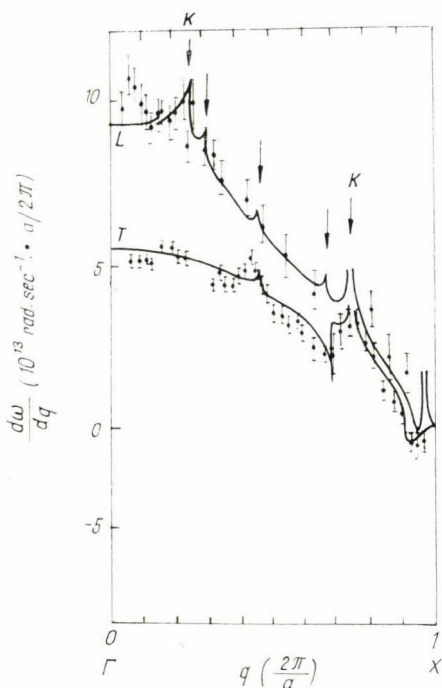


15. ábra. Rácsrezgések spektruma alumíniumban.

A kísérleti pontok (*Stedman* és *Nilsson*, Phys. Rev. 145, 492, 1966) mellett a csak párerőket figyelembe vevő (szaggatott vonal) és a háromtest-erőket is tekintetbe vevő (folytonos vonal) számítás [3] látható.

\* A hosszúhullámú rácsrezgések vizsgálatánál tehát a  $\bar{P} \rightarrow P_0$  közelítés teljesen hibás, hiszen — mint a 3. ábrán is látjuk, —  $r_s > 5$ , 32 esetén pl.  $B_{el}^{(0)} < 0$ , ami  $1/\bar{P}(0)$ -ra (l. 4.39) természetesen igaz,  $1/P_0(0)$ -ra azonban nem.





16. ábra. Longitudinális (L) és transzverzális (T) rácsrezgések csoportsebessége alumíniumban az (100) irányban. A folytonos vonal a két- és háromtest-erők járulékát is tekintetbe vevő dinamikai mátrixon alapul [3], a kísérleti pontok rendkívüli pontosságú neutronszerzési kísérlet eredményei (Weymouth és Stedman, Phys. Rev. B2, 4743, 1970). Az elmélet a Kohn-szingularitások (K) mellett a harmadrendű válaszfüggvény deriváltjának szinguláris értékeinél is anomáliát jelez:  $q=0,43$ -nál a mérések határozottan utalnak is erre.

A  $v$  potenciál 2 paraméterét az egyensúlyi térfogat és  $c_{44}$  észlelt értékéből rögzítették. Az egyezés igen jó, de még többet látunk a 16. ábrán, ahol a fononok csoportsebességét, a  $\left(\frac{d\omega}{dq}\right)$  mennyiség mért és számított értékét ábrázoltuk.

Míthogy a  $D_{el}^{(2)}$  matrix elemeiben fellép a  $\tilde{P}(q)$  redukált polarizációs függvény, a fenti deriváltban a

$$|\mathbf{q} + \mathbf{G}| = 2k_F \quad (4.74)$$

helyeken szingularitást kell találnunk. Alumínium esetén  $Z=3$ , azaz

$$2k_F = 2(9\pi^2/\Omega_0)^{1/3} \sim \frac{2\pi}{a} \cdot 2,255,$$

a lokális térfogatváltozás miatt, modulálják, és ezt a modulációt a dinamikai feladat  $D$  matrixának magasabb rendű tagjai „adják vissza”. Így a homogén deformációk módszerében  $|v_q|^2$ -ig számolva, az eredmény annak felel meg, hogy a dinamikai matrixban a

$$D_{el} = D_{el}^{(2)} + D_{el}^{(3)} + D_{el}^{(4)}$$

tagokig bezárólag számítjuk ki a dinamikai matrixot és csak ezután térünk rá a  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  határátmenetre. (Belátható, hogy  $D_{el}^{(3)}$  és  $D_{el}^{(4)}$   $\mathbf{q}$  szerinti sora tartalmaz  $[v(\mathbf{G})/E_F]^2$ -rendű járulékokat is.)

Amikor tehát  $E_{el}^{(2)}$ -ről, mint párerők járulékáról beszélünk, tekintetbe kell vennünk, hogy ez csak a térfogatot változtatlanul hagyó elmozdulások szempontjából helyes kép: a térfogat lokális változása és emiatt  $k_F$  megváltozása esetén sajátos „többtest-erők” jelennek meg és ez a dinamikai feladat megoldásakor expliciten jelentkezik a magasabb rendű válaszfüggvényeken keresztül. (Az említett szerzőknek éppen a fenti probléma elemzése során sikerült — a fentiekből érthető módon — összefüggéseket találniuk az  $\varepsilon$  függvény  $\Omega_0$  szerinti deriváltja, valamint a magasabb rendű dielektromos válaszfüggvények értékei között.)

A teljes rácsrezgési spektrum számítását, ezzel az elmélet teljesítőképességét, az alumínium esetén illusztráljuk. A 15. ábrán a kísérleti pontok mellett a szaggatott vonalak a másodrendű, a folytonos vonal a harmadrendű közelítést ábrázolja.

tehát például a  $\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a}(2,0,0)$ , ill. a  $\frac{2\pi}{a}(1,1,1)$  reciprokrácsvektorokat tekintve (4.64)-ben, a

$$q = \frac{2\pi}{a}(0,255, 0, 0) \quad \text{és} \quad q = \frac{2\pi}{a}(0,75, 0, 0)$$

helyen szingularitást, u. n. Kohn-anomáliát várunk: ezt a kísérlet valóban mutatja is. A kísérlet még további szingularitásokat is mutat, melyek *nem* a (4.74) egyenlőséggel kapcsolatosak. *Broman* és *Kagan* kimutatták, hogy ezek egy része mindenestre a  $D_{el}^{(3)}$ -ban megjelenő  $\varepsilon_2^{-1}(q, q', q'')$  függvény szingularitásainak következményei.

A soktest-erők jelenlétének látványos bizonyítékát nyújtja a fémek ón frekvenciaspektruma. A longitudinális optikai ág frekvenciája másodrendű számolás esetén közel marad a 2. ábrán látható, ionrácsban érvényes értékhez ( $\omega_{L0}^{(2)} \sim 0,56 \times 10^{12}/s$ ). Az észlelt érték  $1,40 \times 10^{12}/s$ , a háromtest-erők járulékát is tartalmazó számítás pedig az  $1,68 \times 10^{12}/s$  értékre vezet [7], azaz  $\omega_{L0}$  értékét lényegében a háromtest-erők határozzák meg.

### 5. Merre tart a kutatás napjainkban?

Az elmondottak alapján láttuk, hogy az elektronfolyadék válaszfüggvényei szerint haladó, a pszeudopotenciál hatványait tartalmazó sorfejtés segítségével a fémek rendszer teljes energiájának leírására alkalmas módszer áll rendelkezésünkre, melynek segítségével az egyszerű fémek kristályszerkezetének, rácsdinamikájának minden kérdése megközelíthető. Melyek azok a problémák, melyek *jelenleg* a kutatók érdeklődésének középpontjában állnak és várhatóan az eddigiekben vázolt elmélet alapján megoldhatónak látszanak?

A felsorolást az egyszerű fémek egymással alkotott *rendezett* ötvözeiteinek vizsgálatával kezdhetjük. Egyforma vegyértékű komponensek esetén a 4. fejezetben leírt pszeudopotenciál-formalizmus aránylag egyszerűen általánosítható arra az esetre, ha az elemi cellában nem egy, hanem többféle ion, tehát többféle potenciálforrás helyezkedik el, az energia kifejezése analóg módon nyerhető. Így meghatározható az ötvözet képződési energiája, várható szerkezete, vagy legalábbis érthetővé válik az észlelt szerkezet stabilitása. Azt a kérdést, hogy vajon mikor *rendeződik* egy két- vagy többkomponensű *rendezetlen* ötvözet és milyen szerkezetet vesz fel, az elmélet további általánosítása útján vizsgálhatjuk meg. Az eredmények közül a Hg—Mg—Cd rendszer eredményes vizsgálata emelkedik ki [4]. A témakör érdekes, mindeddig tisztázatlan területe, mint említettük, a Hume—Rothery szabályok magyarázata.

Régóta vizsgálják a fémek polimorfizmusának, különböző fázisok egymásba való átalakulásának jelenségét is. A stroncium például szobahőmérsékleten és normális nyomáson lapcentrált köbös szerkezetű, de a hőmérséklet és/vagy a nyomás növelésével tércentrált szerkezetűvé válik. A teljes energia minimuma csak zérus hőmérsékleten feltétele egy szerkezet kialakulásának, nem túl alacsony hőmérsékleten az entrópiataggal kibővített *szabad energia* minimumát kell keresnünk. Ez a rezgési spektrum ismeretében nem nehéz, és a számítás szerint a stroncium pszeudopotenciálja alapján valóban várható a tapasztalt elsőrendű fázisátalakulás, noha az elméleti érték [4] a 150 K átalakulási hőmérsékletre vezetett, ami az észleltnek csupán mintegy ötödrésze. Érthető a gallium már tárgyalt szerkezetének egy másik



észlelt szerkezetbe, a gallium II-be való átalakulása is nyomás alatt. Nyílt kérdés ezen a téren a fém-szerkezet stabilitása az egyszerűbb szerkezetekkel szemben. A kérdés annál érdekesebb, mert nagy nyomáson a szilícium és germánium is ezt a szerkezetet választja és fém-szerű tulajdonságúvá válik: ez tehát a *IV A csoport elemeinek közös fém-szerkezete*.

A fentiek logikus általánosítása az elmélet továbbfejlesztése, részben a *folyékony és amorf* fémek tulajdonságainak leírására, részben magának az *olvadás* jelenségének a kvantitatív tárgyalására [13]. Az olvadt fém esete voltaképpen belefért a leírt elmélet kereteibe: az elméletben szereplő  $S(\mathbf{k})$  struktúrafaktor „érzi” csupán az olvadás utáni nagyobb „rendezetlenséget”, amennyiben a delta-függvény jellegű szingularitások (a reciprokrács vektorok helyén) eltűnnek és helyettük a folyadékban a sűrűség-eloszlás-függvény folytonos, bár struktúrával rendelkező Fourier-transzformáltja jelenik meg. Ez diffrakciós módszerekkel mérhető, így a kristályos állapotban meghatározott potenciál-paraméterekkel, melyeket az ionok „magukkal visznek” az olvadt állapotba is, a folyékony fém tulajdonságai meghatározhatók.

A formalizmus egyszerű lehetőséget ad a rács hibák, felépítési hibák energiájának kiszámítására. Lényegében itt is az ötvözetek és folyadékok tárgyalásához hasonlóan, a struktúrafaktorral összefüggő általánosításokra van szükség. Igen érdekes alkalmazásokat jelent a félvezetők, sőt szigetelők kohéziós tulajdonságainak vizsgálata a leírt elmélet keretében. Ez lehetséges, annak ellenére, hogy ilyen anyagokban az árnyékolás teljesen más jellegű, mint a fémekben, hiszen a *tökéletes* árnyékoláshoz *szabad* elektronokra van szükség. Gondoljuk azonban meg, hogy a kristály teljes energiájában *minden* kötésben résztvevő elektron járulékot ad, tehát aligha lehet túlzottan nagy jelentősége, vajon fellép-e a betöltött energiasáv és a következő sáv között egy kis energiaréteg vagy sem. Bár ez utóbbi döntően befolyásolja a *Fermi-felületen* elhelyezkedő elektronok viselkedését (elektromos vezetés stb.), a *teljes energiában* azonban szerepe jóval kevésbé jelentős. Ilyen megfontolások vezették Berggren-t, amikor a LiH ionkristály állapotegyenletét meghatározta [14]. Lítium ionokból és protonokból álló rendezett ötvözetből indult ki, mely elemi cellánként („molekulánként”) 2 elektront tartalmazott és ezek az elektronok „fém-szerűen” árnyékolnak. Mivel a kötési energiában a dielektromos állandó értéke csak a reciprokrács-argumentumnál veendő és értéke ott már amúgyis közel van a  $q \rightarrow \infty$ -nél felvett 1 értékhez, az árnyékolás részletei az eredményt alig befolyásolják. (Nem ez a helyzet a rácsrezgések szempontjából, ahol  $\epsilon(q)$  kis  $q$ -nál felvett értékei is fellépnek. Valóban, a „tökéletlen” árnyékolás az ionkristályokra jellemző infravörös-aktív optikai rezgésekre vezet.) A lítium pszeudopotenciáljára a fém-szerű, tiszta lítium kötési energiája szolgáltat adatokat; a proton esetén (és csak a proton esetén!) a „pszeudopotenciál” egyszerűen a Coulomb-potenciál. Így a lítium-fém tulajdonságai segítségével a LiH rácsszerkezete és állapotegyenlete kiszámítható és az eredmények kiváló egyezésben állnak a tapasztalattal. A másodrendűnél magasabb pszeudopotenciál-járulékok Brovman—Kagan által kidolgozott módszerével a kovalens kristályok kohéziós tulajdonságai is vizsgálhatók [15].

Különlegesen nagy jelentőségű az elmélet alkalmazása a nagy nyomások fizikájában. Említettük a fém-szerű hidrogén esetét, ahol az ion-elektron kölcsönhatást egzaktul ismerjük, így a — várhatóan a közeli jövőben megvalósuló — kísérletek eredményei közvetlenül a válaszfüggvények, azaz az elektronfolyadék tulajdonságait tükrözik. A kompresszibilitás számítása nagy nyomásokon cáfolhat vagy alátámaszthat geofizikai, asztrofizikai elméleteket, melyek fém-szerű állapotú anyag jelenlétével számolnak



[16]. A fémes hidrogén szerkezetére egyébként az elmélet igen anizotrop, „szálas” struktúrát jósol [17]; a szálak irányában történő nyírás modulusai nagyságrenddel kisebbek a merőleges deformáció modulusainál.

A kohézió itt ismertett elméletét *egy-átmeneti* fémekre is alkalmazhatjuk. Láttuk, hogy a szórási potenciál expliciten csak a szerkezeti energiatagokban jelenik meg, a többi járuléka az *elektronok sűrűségétől*, az *átlagos potenciáltól* függ. (Ez az elektrongáz statisztikus atommodelljének alapján nem meglepő.) Azt várhatjuk, hogy bár az átmeneti fémekben az elektronfolyadék homogenitására, a közel szabad elektronok válaszfüggvényére tett feltevések kevésbé érvényesek, bizonyos feladatok (pl. állapotegyenlet nagy nyomáson) megoldására a modell mégis jó kiindulási alapul szolgálhat. A vizsgálatok szerint [18] ez így is van, mindaddig, amíg a periódusos rendszer III B—VI B oszlopaiban levő fémeket vizsgáljuk, ahol a *d*-héj legfeljebb félig van betöltve. Ennél nagyobb betöltöttség esetén a *d*-elektronok szerepe a kohézió fenti elmélete segítségével közelítőleg sem írható le.

Érdemes itt még megemlíteni az egyszerű és átmeneti fémek után a ritka föld-fém sorozat 15 elemét. Ebben a csoportban az elemek az *f*-héj betöltésétől függően négyféle szerkezetben kristályosodnak és ezek a szerkezetek nyomás alkalmazásával egymásba alakulnak át. Sokáig azt hitték, hogy itt a szorosan kötött *f*-elektronok „aktív” szerepet játszanak, amennyiben a fázisátalakulásokat az *f*-állapotok és az *s*—*d* vezetési elektronok kölcsönhatása okozza. Nemrég sikerült az egész ritka-földfém csoportra érvényes fázisdiagramot konstruálni, melyet kizárólag a közel szabad *s*—*d* elektronok teljes energiája határoz meg, míg az *f*-elektronok csupán a pseudopotenciál paraméterein keresztül éreztetik jelenlétüket [19].

Alapvető jelentőségű a kohézió szempontjából a fémekben fellépő soktest-erők vizsgálata, erről a dolgozat megfelelő helyén kitértünk.

Végül megjegyezzük, hogy az ismertett elmélet egyáltalában nem az egyetlen, mely a kohézió, a rácsdinamika vizsgálatára alkalmas. Ismeretesek a Thomas—Fermi statisztikus model továbbfejlesztett, self-consistent változatai, melyek többé-kevésbé bonyolult, általában nagy számítógépeket igénylő módszerekkel több esetben sikeresen reprodukálják a kohéziós energiával, állapotegyenlettel kapcsolatos kísérleti adatokat [20]. Egy ilyen számítás [21] során pl. a nátrium fémek a 12-szeresen (azaz teljesen) ionizált atommagokból és megfelelő sűrűségű elektrongázból építették fel és a próbahullámfüggvényeket több self-consistent lépésben javították. Eközben „felépültek” a nátrium-ion szorosan kötött elektronhéjai, melyek a szabad ionétól alig különböznek és „kialakult” a *3s* elektronokból a közel homogén Fermi-folyadék is. Bár egy ilyen jellegű számítás értékes és hasznos például az iontörzs-állapotok fém-beni apró változásának vizsgálata szempontjából, a végeredmény nem sokat tükröz a fémes kötésben lényeges és kevésbé lényeges elemek viszonyáról, alkalmatlan a különböző rácsszerkezetek összehasonlítására, fémes kohézió kialakulásának nyomkövetésére.

Úgy tűnik, hogy az elektronfolyadék sokrészeske-elméletét a pseudopotenciál-fogalommal sikeresen ötvöző, ismertett elmélet a fémek szerkezetének, fázisátalakulásainak, dinamikai jellemzőinek még sok meg nem értett problémájára adhat fizikailag világos, áttekinthető magyarázatot.

### Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet fejezem ki munkatársamnak, Kollár Jánosnak, akivel közös eredményeinkből többször idéztem és aki bíráló megjegyzéseivel e dolgozat megírásában nagy segítséget jelentett.

## IRODALOM

1. *F. Seitz*: The Modern Theory of Solids, McGraw-Hill, 1940.
2. *H. Hellmann és W. J. Kassatotchkin*, J. Chem. Phys. **4**, 327, 1936.
3. *E. G. Brovman és Ju. Kagan*, Uszp. Fiz. Nauk **112**, 369, 1974 és Lattice Dynamics (szerk. Maradudin és Horton), North Holland, 1974, 191—300. o.
4. *V. Heine és D. Weaire*, Solid State Physics (szerk. H. Ehrenreich, *F. Seitz* és *D. Turnbull*), vol. 24., Academic Press, 1970, 250—463. o.
5. *Solt György*, Magyar Fiz. Folyóirat **14**, 89, 1966.
6. *G. Leibfried*, Encyclopedia of Physics **7**, 104—324. o. (Szerk. S. Flügge) Springer, 1955. (Orosz fordítás: Izd. Fiz. Mat. Lit. 1963.)
7. *E. G. Brovman és G. Solt*, Solid State Comm. **8**, 903, 1970.
8. *D. Pines*: Elementary Excitations in Solids, Benjamin Press és *D. Pines — Ph. Nozieres*: Theory of Quantum Liquids, vol 1., Benjamin Press 1966. (Orosz fordítás: Izd. Mir, 1965., ill. 1967.)
9. *N. W. Ashcroft és G. C. Langreth*, Phys. Rev. **155**, 682, 1967.
10. *D. Stroud és N. W. Ashcroft*, J. Phys. F. **1**, 113, 1971.
11. *Budó Á.*, Mechanika, Tankönyvkiadó, 1953.
12. *E. G. Brovman és Ju. Kagan*, Zsetf **57**, 1329, 1969.
13. *D. Stroud és N. W. Ashcroft*, Phys. Rev. B **5**, 371, 1972.
14. *K. F. Berggren*, J. Phys. C **2**, 802, 1971.
15. *A. Morita, T. Soma és T. Takeda*, J. Phys. Soc. Jap. **32**, 29, 1972.
16. *N. W. Ashcroft*, Phys. Rev. Lett. **21**, 1748, 1968.
17. *E. G. Brovman, Ju. Kagan és A. Holas*, Zsetf **61**, 2429, 1971.
18. *G. Solt és J. Kollár*, Sol. State Comm. **16**, 453, 1975.
19. *B. Johansson és A. Rosengren*, FOA report C 4594, 1974 és *G. Solt és J. Kollár*, KFKI preprint **34**, 1975.
20. *F. W. Averill*, Phys. Rev. B **6**, 3637, 1972, vagy *E. Snow*, Sol. State Comm. **13**, 1775, 1973.
21. *Tong*, Phys. Rev. B **6**, 1189, 1972.



# KÖNYVISMERTETÉS

Sz. V. Tyablikov: Metodü kvantovoj teorii magnetizma,  
(A mágnesség kvantumelméletének módszereit)

„Nauka” Moszkva, 1975.

Javított és kiegészített második kiadás

Sz. V. Tyablikov professzornak, a mágnesség elmélete kiemelkedő művelőjének nagysikerű könyve javított és kiegészített második kiadása is megjelent. Az első kiadás (1965) sikerére jellemző, hogy röviddel az orosz nyelvű kiadás megjelenése után a könyv angolul is megjelent („Methods in the Quantum Theory of Magnetism, Plenum Press, New York, 1967) és az angol nyelvterületen is nagy sikert aratott. A könyv összefoglalóan ismerteti azokat a legfontosabb módszereket, amelyeket napjainkban a mágnesség kvantumelméletében alkalmaznak: a közelítő második kvantálás módszerét, a molekuláris tér módszert és a termodinamikai Green-függvények módszerét, megmutatva egyben érvényességi határaikat is. Mindhárom módszer alapos ismertetésén túlmenően bemutatja azokat a legfontosabb eredményeket is, amelyeket e módszerek segítségével elértek a mágnesség elméleti kutatása területén. Így a módszerek elsajátításán messze túlmenően mély betekintést nyerünk a mágnesség modern kvantummechanikai elméletébe is egy olyan szakavatott vezető segítségével, aki mind a módszerek kidolgozása, mind azok alkalmazása területén maradandóan megörökítette a nevét és akinek az időelőtti megszakadt munkásságát ma is nagy nemzetközi elismertség és megbecsülés övezi. A monográfia eredeti szövegébe a szerkesztő a szerzői javításokat átvette.

A könyv kiegészítő fejezeteiben a mágnesség kvantumelméletében elsősorban a Green-függvényes technika alkalmazásával elért néhány újabb eredményt foglalnak össze a szerzők, akik Sz. V. Tyablikov professzor tanítványai voltak. Ezek a kiegészítő fejezetek egyrészt jól illusztrálják a Green-függvény módszer effektivitását, másrészt több új, lényeges eredményről tájékoztatják az olvasót. Ki szeretném emelni a kiegészítés V. fejezetét, amely a spin-fonon kölcsönhatást tárgyalja az anharmonikus ferromágneses kristályokban. Ezek a vizsgálatok annakidején Sz. V. Tyablikov professzor javaslatára és aktív részvételével kezdődtek meg. A monográfia e problémakörrel foglalkozó fejezetét a téma neves szakértője, N. M. Plakida írta.

A monográfiát haszonnal forgathatja mindenki, aki betekintést kíván nyerni a mágnesség modern kvantummechanikai elméletébe és meg akar ismerkedni az ott — és egyben az elméleti szilárdtestfizika számos más területén — használatos modern, effektív módszerekkel.

S. T.

J. Erő, J. Szűcs (szerk.): Nuclear structure study with neutrons  
Akadémiai Kiadó, 1974.

A könyv a Budapesten 1972-ben megtartott „Nuclear Structure Study with Neutrons” nemzetközi konferencia anyagát tartalmazza.

A kötet első — nagyobbik — része a meghívott előadók előadásait tartalmazza, amelyek a plenáris ülésen hangzottak el. Ezen belül a témák felölelik a neutronfizika legaktuálisabb elméleti, kísérleti és technikai eredményeit. A következő előadások hangzottak el:

I. M. Frank: Magszerkezet vizsgálata neutronokkal

R. O. Lane: Könnyűmagok szerkezetének vizsgálata neutronokkal

Yu. P. Popov: Magasan gerjesztett állapotok magspektroszkópiája, és a neutronrezonanciák  $\alpha$ -bomlásának vizsgálata.

R. E. Chrien: Neutronrezonancia állapotok rádióaktív bomlása.

G. R. Satchler, F. G. Perey: Optikai modell.

S. F. Mughabghab: Nemstatisztikus effektusok radiációs neutronbefogásnál.

C. Mahaux: Eltérések a statisztikus modelltől.

H. C. Pauli: Maghasadás-kollektív modell ellenőrzése.

F. L. Shapiró: Ultrahideg neutronok.



H. H. Barschall: Intenzív nagyenergiájú neutronforrások.  
 S. Cierjacks: A karlsruhei gyorsneutron repülési-idő berendezés.  
 E. Moll: Francia—német nagyfluxusú reaktor és magfizikai berendezései.  
 M. S. Moore: W. N. R. a Los Alamosi neutron repülési-idő berendezés.  
 Yu. S. Yazvitskii: IBR—2 impulzusreaktor mint neutronforrás.

A kötet második részében az összefoglaló előadások anyagát találjuk, amelyeket ismert szerzők állítottak össze a neutronfizika elméleti és kísérleti témaköreiből saját eredményeik és a beküldött előadások alapján.

L. M. Bollinger:  $(n, \gamma)$  spektroszkópia.  
 H. H. Bolotin: Magspektroszkópia neutronokkal.  
 N. Cindró: Optikai modell kutatások.  
 H. A. Weidenmüller: Statisztikus modell vizsgálatok.  
 I. Bergqvist: Neutron befogási mechanizmus és nemstatisztikus effektusok.

A kötet utolsó részében a beküldött előadások rövid összefoglalóit találjuk. Valójában a kötethez tartozik még a Központi Fizikai Kutató Intézet kiadványa is, amelyben a beküldött előadások teljes szövege található.

L. A.

**Menyhárd Nóra (szerk.): IUPAP International Conference on Statistical Physics  
 Akadémiai Kiadó és az MTA Központi Fizikai Kutató Intézete, Budapest, 1975.**

A kötet a Nemzetközi Elméleti és Alkalmazott Fizikai Unió (IUPAP) tavaly augusztus végén Budapesten rendezett Nemzetközi Statisztikus Fizikai Konferenciájára beküldött előadások kivonatát tartalmazza. A Konferencia plenáris ülésein meghívott előadók által tartott előadások teljes anyagát az Akadémiai Kiadó és a North-Holland Publishing Co. közös gondozásában rövidesen megjelenő kiadványában külön teszik közzé.

A Konferencia a IUPAP által két-három évenként megrendezett statisztikus fizikai konferenciák sorába tartozott, így az volt a feladata, hogy a tudományág utóbbi néhány évben bekövetkezett fejlődéséről a lehetőségekhez képest minél hűbb áttekintést adjon, és felmérje a várható fejlődési tendenciákat. Ennek megfelelően a Konferencia programjának kialakítása gondos előkészítést igényelt. Magát a programot egy a terület kiemelkedő szaktekintélyeiből álló Nemzetközi Tudományos Programbizottság dolgozta ki, ugyanez a Bizottság látta el a Konferenciára beküldött előadások szelekciójának feladatát is. A Nemzetközi Programbizottság a hazai szervezőkkel teljes egyetértésben azt a vezérelvet fogadta el kiindulópontul, hogy a Konferencia programját egy széles, és az érdeklődés homlokterében álló központi téma köré csoportosítja annak érdekében, hogy elkerülje a Konferenciának sok független al-konferenciára való szétesését. A statisztikus fizika jelenlegi fő fejlődési irányvonalainak mérlegelésével a centrális téma szerepére a fázisátalakulások és általában az instabilitások témakörét választották ki. A Konferenciára beküldött előadások téma szerinti megoszlása igazolta e választás helyességét: a bejelentett előadások lényegesen nagyobb fele közvetlenül vagy többé-kevésbé közvetett módon a centrális témához kapcsolódott. Ezt a tényt a jelen kötet is tükrözi. Az előadások kivonatát a kötetben a Konferencia szekcióinak megfelelően rendezték el: a Fázisátalakulások és kritikus jelenségek c. szekció anyaga terjedelmét tekintve a többi öt szekció anyagát két-háromszorosan múlja felül. Ugyancsak az instabilitások témaköréhez kapcsolódik egy sor előadás a Fundamentális problémák és szigorú eredmények c. matematikai jellegű szekcióból, a Soktestprobléma c. szekcióból, valamint a Nyílt rendszerek — hőmérsékleti egyensúlytól távoli rendszerek c. szekció anyagának lényegében az egésze is. Ez nem jelenti azt, hogy a statisztikus fizika „hagyományosabb” fejezetei háttérbe szorultak volna, ezeket a Folyadékok egyensúlyi tulajdonságai, ill. a Transzport folyamatok és kinetikus elmélet c. szekciókba sorolt előadások reprezentálják.

A konferencia-anyagok publikálásának egyre jobban elterjedő módszerét követve a kötetet a szerzők által beküldött gépirásos kéziratok fotografikus másolásával sokszorosították, ami szükségképpen maga után vonja a külső megjelenés bizonyos mértékű egyenetlenségét, de biztosítja az igen gyors megjelenést.

Az elmondottakból következik, hogy a kötet nagy mennyiségű hasznos információt nyújt mindazok számára, akik a statisztikus fizika jelenlegi főbb fejlődési irányairól áttekintést akarnak kapni.

Kondor Imre

**F. Westermann: Laser  
Teubner Studienskripten, Stuttgart, 1976.**

A közel 200 oldalas könyvecske egy NSZK-beli főiskola előadásának anyaga. Bár a tárgyalás az egyetemi alapstudiumok ismeretét feltételezi, mégis szélesebb körben élvezhető, mert az első fejezetekben (közel 70 oldalon keresztül) a szükséges alapokat összefoglalja. Így a könyv a téma önálló tárgyalása. A lézerek előállításának jelentősége közismert. A szilárdtestfizika kutatása számára eddig hozzáférhetetlen területeket nyitott meg. A nemlineáris optika, a Raman-spektroszkópia fejlődése, az atomi átmenetek idejének közvetlen meghatározása stb. mind ezeknek az új fényforrásoknak köszönhető. A technika területén a technikai optika és a híradástechnika kapott új ösztönzéseket a lézerek által. Eddig a technikai optika az optikai jelek regisztrálásakor kizárólag az intenzitásra szorítkozott, mivel az optikai fényforrások statisztikus fáziseloszlása a fázisinformáció kiértékelését lehetetlenné tette. A lézer, mint közel koherens fényforrás bevezetése lehetővé tette ennek a problémának a megoldását is. Ez vezetett egy egészen új technika, a holográfia kialakulásához.

A híradástechnika számára a lézer lehetővé tette az optikai híradástechnika kifejlesztését, de számos más területen, mint pl. az orvostudományban, a plazmafizikában is alkalmazásra került a lézer. Az ismertetett könyv a szakfőiskolák és a műegyetemek technikai szemléletű hallgatóit tartja szem előtt, s így tárgyalásában a kvantummechanikai és kvantumdinamikai tárgyalás helyett a félklasszikus Boh — Sommerfeld elméletre támaszkodik. Ezt nem érezzük szerencsésnek.

T. Gy.

**K. Wiesemann: Einführung in die Gaselektronik  
Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1976.**

A felszabadulás előtt szakkönyvtáraink elsősorban német nyelvű könyvekkel voltak tele, csak lassan szaporodtak az angol nyelvterületről származó munkák. A felszabadulás után erőteljes fejlődésnek indult a szovjet szakirodalom felhasználása először fordításban, ma már eredetiben is. Államunk anyagi támogatása ellenére sem engedhetjük meg, hogy csak magyar nyelvű szakirodalmat olvassunk. Talán még nem késő arra is felfigyelnünk, hogy a közel 100 millió német nyelvterületen megjelenő szakkönyvek sem lehetnek számunkra közömbösek. Könyvismertetés című rovatunkban már több ízben bemutatunk a Teubner Studienbücher sorozatban megjelenő köteteket. Ezek szerzői általában német egyetemek előadói, akik több éven át előadásaikban csiszolt anyagot könyv formájában megjelentetnek. Az ilyen munkákban nem a téma eredetiségét kell keresnünk, hanem a feldolgozás módját, a tárgy aktuálisan való feldolgozását. Véleményünk szerint a magyar egyetemek előadói is hazánk határain túlnövő érdeklődésre tarthatnának számot, ha a német kollégák mintájára akár hazai, akár külföldi kiadók útján közkinccsé tennék tudásukat. Közismert, hogy szemben a magyar matematikusokkal, fizikusaink ez irányú tevékenysége ezen a területen csekély.

A szóban forgó munka főfeladatának a gázelektronika mikroszkopikus és makroszkopikus jellemzői közötti összefüggés bemutatását tekinti. Mivel minden jellemző mennyiség egy megfigyelés modellszerű értelmezéséből származik, ezért a könyv először a legegyszerűbb modell keretében bemutatja a kísérleti tapasztalatot és annak értelmezését. Ennek megfelelően az első négy fejezet az önállóan kisüléssel, — makroszkopikus jellemzőkkel foglalkozik. Az 5—14. fejezetben részben az elemi folyamatokat és az őket leíró mikroszkopikus mennyiségeket, ill. a hozzájuk tartozó makroszkopikus együttthatókat tárgyalja. Részletesebben nézve az 5—10. fejezet a rugalmas ütközésekkel, a diffúzióval és a drifttel foglalkozik. Az utolsó két fejezet az önállóan kisülésről az önállóra való átmenetet részletezi.

T. Gy.

**S. Grossmann: Mathematischer Einführungskurs für die Physik  
Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1976.**

A könyvecske 1976-ban már második kiadását érte meg. Szerzője nemcsak a könyv alapján oktató matematikus előadók tapasztalatát öntötte annak idején nyomtatott formába, s vette tekintetbe a második kiadásban, hanem maga is vezetett segítségével egy kisebb csoportot. Ha mindig szemináriumszerű anyagfeldolgozást igényel is ez a munka, különös gondot fordít annak ellenőrzésére, hogy valóban megértette feldolgozója az adott anyagot. Erre szolgálnak az önellenőrzésre való feladatok, a feldolgozás olyan módja, amely alapján a „tanuló” előtt olyan problémák is merülnek fel, vajon a többféle megoldás közül melyik a jobb, az elegánsabb. A megértést segítik a számszerűleg kidolgozott feladatok is. Egy ilyen könyv egész tartalmi jegyzékét vagy tárgymutatóját



leközölve sem lehet egyszerű izelítőt adni a feldolgozott anyag mélységéről. Kezdődik a vektorokkal (matrixok, tenzorok, transzformációk) folytatódik a vektorfüggvényekkel (gradiens, divergencia, rotáció, Nabla-operátor), az integrálással (a  $\delta$ -függvény), a vektorintegrálással (felületi integrálás, térfogati integrálás), az integráltéttel (A Nabla-operátor előállítás felületi integrálok határértéként, Gauss-tétel, Stokes-tétel) és befejeződik a görbevonalú koordinátarendszerekkel.

T. Gy.

**C. S. Willett: Introduction to Gas Lasers: Population Inversion Mechanics.**  
Pergamon Press, 1974.

Az amerikai szerző 608 oldalas, 283 illusztrációt tartalmazó munkáját hazánkban nyomtatták, mint az International series of monographs in natural philosophy 67. kötetét. A könyv részletesen ismerteti a gázlézerek kifejlesztésének történetét és alapelveit. Ez utóbbiban a közepes szabad úthossznak, ütközési keresztmetszetek, a sebességi és elektroenergiái eloszlások, az első és másodrendű ütközések típusai, a sugárzás és az anyag kölcsönhatása, az oszcilláció feltételei, valamint a hatásfok hullámhossz függése kerül tárgyalásra. A gázkisülések szelektív gerjesztési folyamataival foglalkozó fejezetben az átmeneti valószínűségekre, a szelektív gerjesztési mechanizmusokra vonatkozó elméleti megfontolások után a rezonáns gerjesztési energia (atom—atom; molekula—molekula), a töltés átvitel, a Penning ionizáció, a disszociatív gerjesztési átvitel és rekombináció, a sugárzó kaszkód-pumpálás kerül ismertetésre. — A gázkisülési folyamatokat tárgyaló fejezet magában foglalja a glow, az RF, a HCD és a szakaszos kisülést. Ezen általános fejezetek után következik a speciális semleges, ionizált és a molekuláris lézer rendszerek részletes tárgyalása.

A könyv érdeme, hogy a gázlézerekben fellépő atomi ütközési folyamatokra vonatkozó információkat összeveti a gázkisülési folyamatokkal és az ezekhez tartozó paraméterekkel kapcsolatos ismeretekkel. A hangsúlyt a fizikai jellemzőkre, valamint a gázlézer rendszerekben végbemenő szelektív gerjesztési folyamatokra és az inverz populációt kontroláló mechanizmusra helyezi. A legújabb irodalomjegyzékét is megadja.

T. Gy.

**Landolt — Börnstein: Neue Serie, Gruppe IV Band 3**  
**The r modynamisches Gleichgewicht siedender Gemische**

A kötet a 6. kiadás II/2a és IV/4b kötetének folytatása, és az 1954—1973 időszakban közölt tárgykörbe vágó eredményeket dolgozza fel.

Az elméleti bevezetés tartalmas összefoglalót nyújt a forrásban levő keverékek termodinamikájáról (részletesen utóbbi a II/2a kötetben található) a gőznyomásdiagramokról, az ideális és nem ideális keverékekről, a Duhem Margules összefüggésről, az aktivitásokról és aktivitási koefficiensekről a Redlich—Kistner és Wilsen egyenletekről, a fugacitásról az állapotegyenletekről és a kritikus állapot jellemzőiről.

A táblázatokban a keverékek összetételét móltörtben vagy tömegarányban adták meg. Az egyes komponensek indexelése a forráspont csökkenése szerint történt. A táblázatok egymásutánosságának rendező elve a nagyobb forráspontú elegy sorrendje a szokásos Landolt—Börnstein anyagok szerinti osztályozásban. Ettől függetlenül a könyv végén a komponensek ábécé rendbe foglalt táblázata is megtalálható.

Az adatok általában mérési eredmények, ha ilyenek nem álltak rendelkezésre, átlagolt irodalmi értékeket használtak fel. A táblázatok általában a gőznyomásokon kívül egyéb adatokat is tartalmaznak, mint pl. folyadék és gőz sűrűségeket, keverék törésmutatókat, keveredési hőket stb. Ebből a szempontból a kötet nem különíthető el élesen a IV/c „Oldhatóság” c. kötettől. A nyomásadatokat egységesen bar-ban adták meg.

A kötet lényegi részét 551 db kétkomponensű és 90 db három, ill. négykomponensű elegyre vonatkozó összetétel gőznyomás táblázat képezi.

Egy két jellemző adat: széntetraklorid 34 esetben, alkohol 19 esetben, aceton 22 esetben, benzol 44 esetben és a víz 48 esetben szerepel a komponensek között, néhány bonyolultabb vegyület pl. a sztearinsav-metilészter, több bonyolultabb fluorvegyület, hidrogénezett aromás vegyület is megtalálható a komponensek között. A komponensek száma 271.



Míg a kötet elődei általában inkább technikai jelentőségű elegyekkel foglalkoztak, jelen kötet a rendelkezésre álló források rendszeres feldolgozásával a fizikokémikusnak, a mérnöknek nagy segítséget nyújthat bármilyen a témakört érintő kérdés megoldásánál. Egy ilyen jellegű könyv szerkesztése, mindig komoly kérdéseket vet fel, mert a teljesség fogalma itt kézenfekvőbb és mégis gyakorlatilag elérhetetlenebb mint pl. egy elméleti műnél.

Korunk kissé túlságosan szerteágazó tendenciáit tekintve, minden igényes rendszerező, adatgyűjtő tevékenység a tudomány számára felbecsülhetetlen értékű. Ez adja meg a kötet rangját, legfőbb értékét.

*Raksányi Kund*

**J. C. Dainty: Laser Speckle and Related Phenomena  
Springer-Verlag, 1975.**

Amikor a lézersugár megvilágítja egy test felületét, igen szembetűnő jelenséget lehet megfigyelni. A visszavert fény szemcsézettnek tűnik, mely szemcsék alakja változik a megfigyelés, vagy a megvilágítás irányának megváltoztatásával. A jelenség annyira feltűnő, hogy a szemcsékép tulajdonképpen csak mint lézer szemcsékép vált ismertté, pedig a jelenség alapjai már régen ismeretesek, hiszen már Newton is megfigyelte klasszikus fényforrást használva.

A diffúz felületű test különböző mikroszerkezetén szóródó fénysugarak terjedésük útján egymást erősítik, illetve gyengítik. Ez a „kölesönhatás” vezet ezután a szemcsékép kialakulásához.

A szemcsékép persze csak a koherens lézerfény esetén kontrasztos és ezért könnyebben megfigyelhető. Először tulajdonképpen mint hátrány jelentkezett; a lézerfényvel készített optikai leképezések foltosak, szemcsésék voltak. A feladat a szemcsékép eltüntetése volt, megőrizve a koherens leképezés előnyeit. Ezért foglalkozik ezen összefoglaló cikkgyűjtemény negyedik cikke ezen problémakörrel. A feladat megoldása a fény koherenciafokának valamilyen módon való csökkentése és ezen módszereket ismerteti a negyedik cikk.

A szemcsékép a későbbi fejlődés során azonban hasznosnak bizonyult. A tárgy elmozdításával a tárgy felületére jellemző szemcsékép is elmozdul. A szemcsékép elmozdulásának valamilyen módszerrel való mérése a tárgy elmozdulásának mérését teszi lehetővé, anélkül, hogy a tárgyat mérőműszer érintené. Ezen az elven alapuló módszerekkel nagyon fontos gyakorlati mérési feladatokat lehet megoldani.

Mérni lehet a tárgyak elmozdulásán kívül azok sebességét, deformációját, elfordulását stb. a fényhullámhossz nagyságrendjébe eső pontossággal. A lézer szemcséképet felhasználva alakfelismerési vizsgálatokat lehet végezni. Mindezen kérdésekkel a cikkgyűjtemény ötödik és hatodik cikke foglalkozik.

Természetesen mindezen módszerek kidolgozásához ismerni kell a véletlen szemcsékép statisztikáját, továbbá az intenzitás statisztikáját két szemcsékép koherens és inkoherens szuperpozíciója esetén, a szemcséképnek és egy koherens hullámnak szuperpozíciója esetén stb. Ezekre a kérdésekre kapunk választ a második elméleti cikkből.

A szemcsékép módszer meglepő módon gyakorlati alkalmazást talált inkoherens fény esetén is. A csillagászati megfigyelésekben a légkör által létrehozott szemcsékép többszörösére növeli a legkisebb feloldható szögtávolságot. A szemcsékép tehát elfedi a kis szögtávolságra elhelyezkedő kettős csillagokat, a kettős csillagot egy csillagnak mutatja. A szemcsékép lefotózása, majd az így kapott negatívon létrehozott fényszórásban jelentkező „interferenciacsíkok” azonban elárulják a kettős csillag jelenlétét és végeredményben a távcső elméletileg lehetséges felbontóképességének kihasználását teszik lehetővé. Ezen problémakörrel szól a kötet utolsó cikke.

Amint már említettem, klasszikus fényforrásokkal már régóta megfigyelték a szemcséképet és ez gyakorlati alkalmazást talált a csillagászatban. A kötet harmadik cikke a szemcsékép keletkezésének elméletét tárgyalja tetszés szerinti koherenciafokú fény esetén, azaz a klasszikus fényforrásokkal létrehozható szemcsékép elméletét.

A kötethez J. C. Dainty írt bevezetőt, melyben a szemcsékép megfigyelésének és felhasználásának történetét mondja el.

A cikkgyűjtemény a *Topics in Applied Physics* sorozat 9. kötete és méltó az előző kötetek hagyományához. A cikkek stílusa világos, közérthető, könnyen olvasható. A szerzők a terület világszerte elismert tekintélyei, akik jó előadásmódjukról közismertek. A kötet nyomdatechnikai kivitele tetszetős és áttekinthető. A könyv egy nagyon modern terület „state of art”-ját nyújtja naprakész állapotban (a hivatkozások jó részének megjelenési ideje 1975). Optikai mérés technikával foglalkozó kutatók részére különösen ajánlható.

*Bakos József*

**K.-H. Hellwege: Einführung in die Festkörperphysik.  
Springer Kiadó, 1976.**

A Heidelberger Taschenbücher sorozatban Hellwege egy-egy 160 oldalas könyvecskében Einführung in die Physik der Atome, ill. Einführung in die Physik der Molekeln címmel írt e könyv anyagának előkészítéséről. A sorozat folytatója — talán, mert Hellwege megbetegedett — O. Madelung lett három kis kötetben megjelent Festkörpertheorie művével (ismertetését l. a Magyar Fizikai Folyóirat 21., 22. és 23. kötetében). Hellwege maga a most ismertetendő 640 oldalas műben folytatta munkáját.

A szilárdtestfizika világszerte a kutatás előterében áll. Számos más kutatási terület, mint pl. a magfizika a saját feladatai megoldására kidolgozott módszereit, eszközeit ma a szilárdtestfizika szolgálatába állítja. Hellwege munkája a kristályrács sztatikájával kezdődik. Itt kap helyet a kristallográfia szokásos alapelemei mellett a kristályhibák ismertetése, beleértve az alkálifalogenid kristályok színcentrumait is, amelyek kutatásának sok évtizedes hagyománya van hazánkban. Hasonló mondható el egyéb ionkristály-tulajdonságokról, mint külső terekben (vagy ennek bizonyos szempontból ellentétes témával) az ionoknak a kristályterekben való viselkedéséről. A Hellwege által tárgyalt témakörök, mint a kristályok mágneses tulajdonságai, elektromos polarizációjuk, a vezetési elektronok a fémekben, félvezetőkben, a kristályokban levő kötött állapotok, a szupravezetés, az energia transzport mint olyan területek, amelyek tisztázásához magyar kutatók is hozzájárultak. Van is a könyvben ajánlott irodalomban magyar szerző idegen nyelven megjelent munkájára vonatkozóan.

Hellwege könyve tankönyv, a fogalmakat, a jelenségeket, a fizikai tartalmat domborítja ki, feladatokkal, szemléletes ábrákkal segíti elő a megértést.

*T. Gy.*

**J. T. Oden és J. N. Reddy: Variational Methods in Theoretical Mechanics  
Springer-Verlag, 1976.**

A variációs módszerek az elméleti fizikában már igen régóta használatosak. Különösen olyan problémák megoldásánál van jelentőségük, amikor a jelenség differenciál-egyenleteinek a megoldása valamely funkcionál szélső értékével hozható kapcsolatba. Másrészt az ún. hatásintegrál szélső értéke pedig a mozgásegyenletek meghatározását teszi lehetővé. Mivel a hatásintegrál invariáns skalár, a variációs elv a mozgásegyenleteknek vonatkoztatási rendszertől független alakját adja.

Oden és Reddy a variációs számítás matematikai megalapozása után annak igen széles körű alkalmazásait mutatják be könyvükben. Elsősorban a kontinuumok mechanikájával foglalkoznak, de megmutatják a fizika más területein (pl. a hővezetés, magnetohidrodinamika problémáinál) a variációs módszerek alkalmazási lehetőségeit. A könyv igen gondosan összeállított irodalomjegyzéket közöl, amely a legújabb eredményeket is tartalmazza.

*Nagy Kármly*

**Foundations of Quantum Mechanics and Ordered Linear Spaces  
Lecture Notes in Physics, Vol. 29. Springer-Verlag, 1974.**

A kvantummechanika szigorú matematikai megalapozása kezdettől fogva a legkiválóbb elméleti fizikusokat és matematikusokat foglalkoztatta. Az elmélet matematikai alapjainak egzakt vizsgálata napjainkban is az aktuális kutatások közé tartozik. Erről tanúskodik ez a könyv is, amely az 1973. március 26—április 6-ig Marburgban rendezett előadássorozat anyagát tartalmazza. Az előadók között kiváló matematikusok és fizikusok szerepeltek. A matematikai tárgyú előadások a vektor-terek olyan tulajdonságait és törvényszerűségeit tárgyalták, amelyek a kvantummechanika megalapozásánál kapnak fontos szerepet. Példaként megemlítjük néhány előadás címét: Orderings of Vector Spaces; Representation of Banach Lattices; Order Ideals in Ordered Banach Spaces, Order Bounded Operators and Central Measures, The Structure of Ordered Banach Spaces in Axiomatic Quantum Mechanics. A fizikai előadások közül különösen a méréssel, a makroszkopikus mérőberendezés és a mikroobjektum kölcsönhatásával foglalkozók tarthatnak számot nagyobb érdeklődésre. Ezek közül is megemlítünk néhányat: Models of the Measuring Process and of Macro Theories; Axiomatics of Preparing and Measuring Procedures; The Representation of Classical Systems in Quantum Mechanics, s így tovább.



A fő előadásokat kiegészítették további kisebb előadások, amelyek a fontosabb témákhoz kapcsolódó speciális matematikai vagy fizikai problémát tárgyaltak.

A 28 előadás anyagát publikáló kötet igen színvonalas tanulmányokat tartalmaz mind matematikai, mind elméleti fizikai szempontból. A kvantummechanika szigorú matematikai megalapozásával foglalkozó fizikusoknak és matematikusoknak ajánljuk.

*Nagy Károly*

**H. G. Schuster (szerk.): One-dimensional conductors  
Vol. 34., Springer, 1975.**

A kötet az „Egydimenziós Vezető Anyagok” fizikájának problémáiról 1974-ben tartott konferencián elhangzott előadásokat tartalmazza. H. G. Schuster bevezető összefoglaló cikke, amelyet a szerző a konferencia után írt, rendkívül hasznos az olyan olvasó számára, aki nem ismeri közelről ezt az érdekes kutatási területet.

Az egyes előadások az egydimenziós vezetők számos különböző problémáját érintik: a kémiai előállításkor támasztandó követelményeket, a vezetési mechanizmust, vagyis a töltések mozgása mechanizmusának kérdését, sávdigram számítások problémáit stb. Az egydimenziós vezetők e különleges tulajdonsága (a rendkívül erős anizotrópia) csak meghatározott fázisállapotban jelenik meg. Számos érdekes kérdés merül fel ezzel kapcsolatban a fázisátmenetek kérdése körül: az úgynevezett Peierls-átmenet és a Frölich-módus és elektromos vezetőképesség. Néhány fontos kérdés a kötetben említetlen maradt — többek között a konferencián való részvétel korlátozottsága miatt is — mégis érdekes áttekintést kap az olvasó az egydimenziós vezető anyagok kutatásának helyzetéről, ugyanakkor sok fontos részletinformációt szolgáltat a könyv az e területen dolgozó tudományos kutatók számára.

*M. D.*

**H. J. Wirz (szerk.): Progress in Numerical Fluid Dynamics  
(Lecture Notes in Physics, 41. kötet).  
Springer-Verlag, 1975.**

A hamar közkedvelté vált „Lecture Notes in Physics” sorozat 41. kötete a belgiumi Kármán Intézetben szervezett hidrodinamikai szeminárium előadásainak az anyagát adja közre. A szeminárium előadásai a hidrodinamika alapegyenleteinek numerikus megoldási módszereivel foglalkoztak. Az előadássorozaton több mint 130 fiatal kutató vett részt Európa csaknem minden országából.

A jól szerkesztett, világos felépítésű könyv tartalma a következő témákra oszlik: két- és háromdimenziós transzonikus és szuperszonikus áramlások, a Navier—Stokes-féle egyenletek numerikus megoldása összenyomhatatlan és összenyomható folyadékokra, két- és háromdimenziós határréteg-áramlások, a véges elemek módszerének alapjai és alkalmazása a hidrodinamikában, hidrodinamikai peremértékfeladatok stabilitásának numerikus vizsgálata, hidrodinamikai feladatok numerikus megoldása analóg szubrutinnal.

Az egyes előadások anyagát jól tagolt, részletes tartalomjegyzék vezeti be, és gondosan összeállított irodalomjegyzék zárja.

A szerzők nem elégszenek meg a hidrodinamikai egyenletek megoldási módszereinek a leírásával: a hidrodinamika elméleti kérdéseivel foglalkozó kutató számára is igen tanulságos az egyes problémák elméleti alapjainak tömör összefoglalása, a különböző megoldási módszerek kritikai összehasonlítása.

A könyv — témájánál és módszerénél fogva — elsősorban olyan mérnököknek és fizikusoknak ajánlható, akik a hidrodinamika alkalmazásaival foglalkoznak. Elméleti fizikával (és nem csak hidrodinamikával) foglalkozó fizikusok érdeklődésére főleg F. de Veubeke „Variációs elvek és a véges elemek módszere a hidrodinamikában” című előadása tarthat számot. Gyakorlati hidrodinamikusoknak a könyv — szinte — nélkülözhetetlen.

Miskolc, 1976. február 18.

*Szabó János*

**Reinhard A. Breuer: Gravitational Perturbation Theory and Synchrotron Radiation  
Lecture Notes in Physics, No. 44. Springer Verlag, 1975.**

Szerző ebben a könyvben a gravitációs sugárzás egy tárgykörének ismereteit foglalja össze. Ez a tárgykör a nemlineáris gravitációs téregyenletekből nyert, lényegében lineáris közelítésben adódó egyenletek sugárzási problémái. Minthogy a linearizált gravitációs egyenletek az elektromág-



neses téregyenletek struktúrájához hasonló szerkezetűek, a sugárzási problémák közül egyes jól ismert „klasszikus” típusok is fellelhetők: ilyen a szinkrotron-sugárzás esete is. Továbbá: az elektromágneses erőter kvantumelmélete néhány fogása és számítási módszere is átvihető a linearizált gravitációs egyenletekre. Szerző ezért említi a perturbációszámítást és a szinkrotronsugárzást a mű címében — bár az az érzésünk, hogy a cím nem találó, nem áll összhangban teljesen a mű tartalmával. A gravitációs sugárzás hatásos mechanizmusának keresése abban a korszakban, amikor ilyen sugárzás tapasztalati kimutatására — úgy látszik — megszületnek a kísérleti feltételek, igen időszzerű. Szisztematikus összefoglalást mindarról, amit a legutóbbi időkben ezen a téren el lehetett érni, csak örömmel vehetünk, annál is inkább, mert Szerző kritikai megállapításokat is tesz, amihez — véleményünk szerint — az összefoglaló tárgyalás segített hozzá (fókuszálás problémája). A gravitációs szinkrotron sugárzás (geodetikus — Kepler-mozgáshoz hasonló — pályákon haladó tömegek sugárzása) modellszerű kidolgozása és aránylag egyszerű leírása minden bizonnyal hozzájárul az általános relativitáselmélettel kapcsolatos elméleti és kísérleti érdeklődés olyan kielégítéséhez, amely a fontos kérdéseket, nyitott problémákat pontosabb megfogalmazásban sokak számára hozzáférhetővé teszi.

*Abonyi Iván*

**B. Humpert: Dynamical Concepts on Scaling Violation and the New Resonances in  $e^+e^-$  Annihilation**  
Lecture Notes in Physics Vol. 45. Springer Verlag, 1975.

A részecskefizika egyik legaktuálisabb kutatási területe a nagyenergiájú elektron-pozitron ütközésekben megmutatkozó lépcsőnhatás elméleti és kísérleti tanulmányozása. Az utóbbi 1–2 évben e területen születtek a legérdekesebb és legmeglepőbb eredmények, amelyek igen élénk elméleti vizsgálatokat váltottak ki.

A tanulmány első része az  $e^+e^-$  ütközések legfontosabb kísérleti eredményeit foglalja össze. A második részben szerző az „ $e^+e^- \rightarrow$  hadronok” folyamat hatáskeresztmetszetének energiafüggését vizsgálja és a kísérleti eredmények alapján megállapítja, hogy a 3 GeV feletti energiáknál a hatáskeresztmetszet állandó, ellentétben a skálainvariancia jóslatával, amely szerint  $\sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadronok}) \sim \frac{1}{q^2}$ , ahol  $q$  a négyes impulzusátadást jelenti. A harmadik rész a 3 GeV felett igen keskeny rezonanciák áttekintésével és a lehetséges elméleti magyarázatok diszkussziójával foglalkozik.

*N. K.*

**E. J. Flaherty: Hermitian and Kählerian Geometry in Relativity**  
„Lecture Notes in Physics” No. 46. Springer Verlag, 1976.

Flaherty monográfiája az általános relativitáselmélet iránt érdeklődő kutatók — és természetesen: egyetemi hallgatók — számára szolgálat bevezetést azokba a modern elméletekbe, amelyek a komplex sokaságokon értelmezett „geometriák” (pl. a „gömbült terek”, vagy „tér-idő”) leírását, matematikai megfogását célozzák. Öröndetes tény, hogy ilyen monográfia megszületett (bár Flaherty nem az egyetlen és első próbálkozó) és kezelhető méretű kötetben a differenciálgeometria, a komplex függvénytan és az általános relativitáselmélet területén a „hagyományos” jártassággal rendelkezőket elvezeti a modern módszerekhez. Reméljük, hogy Flaherty monográfiája egyfelől megkönnyíti a matematikusoknak a gravitáció modern elméletében fellépő matematikai problémák megközelítését, másfelől lehetővé teszi, hogy a fizikusok a matematika modern eszközeit a relativitáselmélet művelésében sikerrel használják fel.

*Abonyi Iván*

**William G. Harter—Christopher W. Patterson: A Unitary Calculus of Electronic Orbitals**  
Lecture Notes in Physics 49. Springer-Verlag, 1976.

A könyvben a szerzők egy új módszert írnak le az atomos és molekuláris elektronállapotok számolására. A módszer a Racah-közelítés továbbfejlesztése, egy háló algoritmus segítségével közvetlenül tudják számolni az orbitális és spin operátorokat, valamint a Slater és az általános Russel—Saunders állapotok közötti transzformációkat. A módszer lényegesen egyszerűsíti az elektronikus számológép használatát ezen problémák esetére.

A könyv két részből áll, az I. részben egy rövid áttekintés után, ami felöleli a Slater és Racah közelítéseket, ismertetik saját módszerüket. A II. részben a módszert alkalmazzák atom és molekula elektronállapotok számolására. A II. rész utolsó fejezetében, illetve 4 függelékben a módszer matematikai aspektusaival foglalkoznak. A könyvet 16 diagram és 6 táblázat egészíti ki.

*J. J.*

**R. Gomer (szerk.): Interactions on Metal Surfaces  
Topics in Applied Physics. 4. kötet. Springer-Verlag, 1975.**

A felületi jelenségek fontossága az utóbbi évtizedek egyik legfontosabb felismerése. A felületek fizikája akkora tudományterület, amelyet egy könyvterjedelem meg se közelíthet, még a címben megjelölt: fémek felülete formájában sem. A kötet szerzői a kölcsönhatások körül is a kémiai adszorpciót választják tárgyukul, amelyet hét önálló, külön szerzők által írt fejezetben tárgyalnak. Ezen elméleti és kísérleti kérdések tárgyalása után alkalmazási területeket ismertetnek, mint: fotoemissziós és téremissziós spektroszkópia, a LEED és Auger metodikák. A tárgyalás fő témája mindenütt nem annyira az adszorpció, mint a felületen végbemenő kölcsönhatás. Ezért kerül a kötet végére egy fejezet a heterogén katalízis koncepciójáról. Olyan kísérleti tények is kerülnek megtárgyalásra, amelyek értelmezésére vonatkozó vélemények ellentmondók. Ezen a kötet úgy segít, hogy megenged bizonyos redundanciát az anyagban, így a specifikus adszorpciós rendszerek diszkussziója három fejezetben is szerepel.

*T. Gy.*

**T. Tamir (szerk.): Integrated Optics Topics in Applied Physics.  
Springer-Verlag, 1975.**

Az integrált optika kb. 6 éves új területe azon a tényen alapszik, hogy a fényhullámok átlátszó anyagok nagyon vékony rétegében terjedhetnek. Ilyen rétegeket összekombinálva és megfelelő konfigurációba felhasználva, az integrált-optikai technológia nagyon sok komponenst valósított meg, amelyek alkalmasak optikai hullámokkal kapcsolatos nagyon sok műveletre. Így a fényt vezethetjük, modulálhatjuk, irányíthatjuk, megszűrhetjük, a térbe kisugározhatjuk, vagy a lézert hatást felhasználva egy vékonyréteg szerkezetben létrehozhatjuk. Mindez nagyon is gyakorlati célok, pl. optikai hírközlés, kis energiával dolgozó berendezések előállítását szolgálják. A könyv célja az integrált optika jelen állapotának ismertetése a közvetlen és a távolabbi jövő lehetőségeit is szem előtt tartva. A tárgyalás a hullámvezető dielektrikumok elméletével kezdődik, majd a nyaláb és hullámvezető kapcsolók ismertetése után a fény modulálása és kapcsolása következik hullámvezető dielektrikumokban, továbbá passzív komponensek gyártása és mérése, és végül félvezető komponensek monolitikus alkalmazása.

Ez a könyv nagyon ajánlható minden modern fizika iránt érdeklődő, persze elsősorban a vele dolgozó fizikusnak.

*T. Gy.*

**U. Gonser: Mössbauer Spectroscopy  
Topics in Applied Physics 5. kötet.  
Springer-Verlag, 1975.**

A modern fizika egyik legnagyobb eredménye a Mössbauer-effektus 18 év előtti felfedezése. Ez az effektus áttörte a mag- és szilárdtestfizika közötti korlátot, és megteremtette az új technikát, a Mössbauer vagy gamma-rezonancia spektroszkópiát. Ez utóbbi aztán nagy lehetőségeket kínáló eszközzé vált a természettudomány és a technológia csaknem valamennyi ágában. A NMR, EPR, LEED és sok más új fizikai módszer mellé odasorakozott minden rövidítés nélkül a Mössbauer spektroszkópia, melynek létrejöttét és elveit legmagasabb szinten ismerteti a kötet, azért, hogy utána megmutassa alkalmazását a kémiában, a mágnességkutatásban, a mágnesesen rendezett vegyületek jellemzésében, a biológiában, a Hold geológiájának és ásványi összetételének megismerésében és végül a fizikai metallurgiában. A magyar kutatókra, akik már eddig is sokoldalú kutatásokat végeztek a Mössbauer effektussal, sajnos nem találtam a könyvben hivatkozást.

*T. Gy.*

MACTA  
YUDOMANTOS ALACLES  
- KÖNYVTÁRA



Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1976. március 18. — Terjedelem: 11,9 (A/5) ív  
76-1393 — Szegedi Nyomda — F. v. Dobó József ig.



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.



## TARTALOMJEGYZÉK

Groma Géza—Kovácsné Csetényi Erzsébet: Reverziós és újraneemesedési folyamatok vizsgálata Al-Zn-Mg ötvözetben .....	271
Jéki László: A $^{252}\text{Cf}$ spontán hasadásánál keletkező neutronok energiaeloszlása .....	281
Solt György: Újabb eredmények fémek kohéziójának és rácsdinamikájának elméletében .....	343

## KÖNYVISMERTETÉS

Sz. V. Tyablikov: Metodü kvantovoj teorü magnetizma (A mágnesesség kvantumelméletének módszerei) (S. T.) .....	395
J. Erő J. Szűcs: Nuclear structure study with neutrons (L. A.) .....	395
Menyhárd Nóra: IUPAP International Conference on Statistical Physics (Kondor Imre) ....	396
F. Westerman: Laser (T. Gy.) .....	397
K. Wiesemann: Einführung in die Gaselektronik (T. Gy.) .....	397
S. Grossmann: Mathematischer Einführungskurs für die Physik (T. Gy.) .....	397
C. S. Willett: Introduction to Gas Lasers: Population Inversion Mechanics (T. Gy.) .....	398
Landolt—Börnstein: Neue Serie (Raksányi Kund) .....	398
J. C. Dainty: Laser Speckle and Related Phenomena (Bakos József) .....	399
K. -H. Hellwege: Einführung in die Festkörperphysik (T. Gy.) .....	400
J. T. Oden és J. N. Reddy: Variational Methods in Theoretical Mechanics (Nagy Károly) ...	400
Foundations of Qantum Mechanics and Ordered Linear Spaces (Nagy Károly) .....	400
H. G. Schuster: One-dimensional conductors (M. D.) .....	401
H. J. Wirz: Progress in Numerical Fluid Dinamycs (Szabó János) .....	401
Reinhard A. Breuer: Gravitational Perturbation Theory and Synchrotron Radiation (Abonyi Iván) .....	401
B. Humpert: Dinamical Concepts on Scaling Violation and the New Resonances in $e^+ e^-$ Annihilation (N. K.) .....	402
E. J. Flaherty: Hermitian and Kählerian Geometry in Relativity (Abonyi Iván) .....	402
William G. Harter—Christopher W. Patterson: A Unitary Calculus of Electronic Orbitals (J. J.) .....	402
R. Gomer: Interactions on Metal Surfaces (T. Gy.) .....	403
T. Tamir: Integrated Optics (T. Gy.) .....	403
U. Gonser: Mössbauer Spectroscopy (T. Gy.) .....	403

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

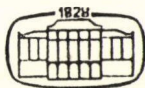
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXIV. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1976



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről levasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését, a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# SZUPRAVEZETŐK MÁGNESES ÁLLAPOTAI\*

KIRSCHNER ISTVÁN

ELTE, Alacsony Hőmérséklet Fizikai Laboratórium, Budapest

## BEVEZETÉS

Elegendően alacsony hőmérsékletek elérésekor a szilárd anyagok egy része elveszti elektromos ellenállását, szupravezetővé válik. A szupravezetés kutatásának legfontosabb állomásait öt pontban lehet megjelölni:

1. Az alapjelenség felfedezése (*Kamerlingh Onnes Heike*, 1911.) [1],
2. A Meissner-effektus felismerése (*W. Meissner, R. Ochsenfeld*, 1933.) [2],
3. A makroszkopikus elmélet kidolgozása (*V. L. Ginzburg, L. D. Landau*, 1950.) [3],
4. A mikroszkopikus elmélet kidolgozása (*J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer*, 1957.) [4],
5. Nagy áramú és nagy mágneses terű szupravezetők műszaki alkalmazásainak kezdete (*J. E. Kunzler, E. Buehler, F. S. L. Hsu, J. H. Wernich*, 1961.) [5].

Az I. típusú szupravezetők fő jellemzője az elektromos ellenállás eltűnése és a mágneses tér kiszorulása az anyagból. Ezzel szemben a II. típusú szupravezetők nagy mágneses tér jelenlétében is megtartják végtelen vezetőképességüket.

A szupravezetés a fontos és érdekes effektusok egész sorát birtokolja, és a fizika szinte mindegyik fejezetével szoros kölcsönhatásban van (pl. a kavantumjelenségek első makroszkopikus megjelenési formája).

Ugyanakkor a technikai alkalmazások címszószerű felsorolása (I. típus: kriotron-elektronika, memóriák, kapcsolók, áram átalakítók, rezgőkörök, erősítők, galvanométerek, hőmérők, bolométerek, részecskeszámlálók, mágnesestér mérők, transzformátorok, kábelek, mágneses lencsék és üregrezonátorok);

II. típus: egyen- és váltóáramú mágnesek, energia tárolók, súrlódásmentes csapágyak, elektromotorok, generátorok, egyen- és váltóáramú transzformátorok, kábelek) is már hatásosan szemlélteti jelentőségét a műszaki fejlesztésben.

E tények adják a magyarázatát annak, hogy az utóbbi évtizedben a szupravezetési kutatások volumene mind az elméleti, mind a kísérleti területen megnövekedett, és felfutásuk meggyorsult.

Ezzel párhuzamosan azonban nem csökkent a megoldásra váró problémák száma, mert az új ismeretek gyakran új kérdéseket tárnak fel, és egyes régebbi eredmények kiegészítése, vagy finomítása is időről-időre felvetődik.

A szupravezetők mágneses jelenség csoportja is ilyen terület. Fontosságát jól demonstrálja az I. típusnál a Meissner-effektus, a II. típusnál a nagy mágneses terek előállításának lehetősége.

\* Érkezett 1975. szept. 1.



A témaválasztást éppen az indokolja, hogy az idetartozó kérdések mind kutatási, mind alkalmazási szempontból nagy jelentőségűek, ugyanakkor még nem eléggé tisztázottak. Dolgozatunk célkitűzése az, hogy hozzájáruljon e problémakör megoldásának folyamatához.

Az értekezésben olyan problémák felvetését és megoldását tűztük ki célul, amelyeket az idevonatkozó irodalomban még nem ismertek fel, vagy nem oldottak meg, de jelentőségük kutatási, illetve alkalmazási szempontból vitathatatlan. Közéjük tartozik a para- és diamágneses szennyezések együttes hatása, kis  $\kappa$ -jú szupravezetők specifikus szatikai és dinamikai tulajdonságai, egy új típusú fázisátalakulás felismerése, a flux creep és a kritikus állapot kielégítő modellje és a szupravezető mágneses állapotok termodinamikai stabilitása.

Az elért *eredmények* lényegét a következőkben lehet röviden összefoglalni:

1. Első feladatként megvizsgáltuk a paramágneses és diamágneses szennyezők együttes hatását a szupravezetők  $T_c$ -kritikus hőmérsékletére. Számításaink során a szennyezőknek az elektron szórás mechanizmusára és a Fermi-felület topológiájára gyakorolt hatását egyaránt sikerült figyelembe vennünk, és ennek megfelelő, általános kritikus hőmérséklet relációt nyertünk.

Kis szennyezés koncentrációt feltételezve,  $T_c$ -re olyan összefüggést kaptunk, amely a szórási és a topológiai változási hatást egyaránt tartalmazza.

A kapott  $T_c$ -nek a nyomástól való függését is megvizsgáltuk, és erre nézve is explicit relációt írtunk fel.

2. Megmutattuk, hogy a szennyezések hatására előállhat a  $T_c = 0$  K határeset. Kiszámítottuk a fellépő szórási mérték változást egyrészt a szórási folyamatok domináns jellege, másrészt a Fermi-felület topológiai változásának domináló szerepe mellett. A kapott összefüggéseket kísérleti eredményekkel való összevetéssel és numerikus számítások segítségével is ellenőriztük.

3. Célkitűzéseink között szerepelt kis  $GL$  paraméterű, II. típusú szupravezetőkben a  $H_{c1}$ -alsó és a  $H_{c2}$ -felső kritikus mágneses tér között fellépő mágneses örvények (vortexek) szatikai és dinamikai tulajdonságainak kísérleti vizsgálata. In — (0–5 at %) Bi ötvözeteket készítve, lehetőségünk nyílt arra, hogy értékes információkat szerezhessünk azokról az átmeneti körülményekről, amelyek közvetlenül a II. típusú szupravezetés megjelenésekor lépnek fel.

Meghatároztuk a kritikus hőmérséklet, a kritikus mágneses terek és a  $GL$  paraméter koncentráció függését, továbbá a kritikus terek hőmérséklet függését, és a  $T_c$  nyomás függését.

4. Felismertük, hogy a Bi tartalom növelésével elérhető kritikus koncentrációnál egy specifikus, másodrendű fázisátalakulás zajlik le, amelynél az I-es típusú szupravezetés II-es típusúba megy át.

5. Arra jutottunk, hogy a kapott flux-flow ellenállást e tartományban a hőmérséklet-függő  $H_{c2}$  írja le helyesen, és kifejezésében egy additív tag is szerepel. Ez eltér a szokásos, magas  $\kappa$ -jú anyagokra kapott empirikus eredményektől.

A mért flux-flow feszültség-áram karakterisztikákon kétfajta görbületet, illetve két lineáris tartományt találtunk. Ebből az következik, hogy a kritikus állapotot két flux-flow ellenállás és két kritikus áram jellemzi.

6. E vizsgálatok közben többféle alacsony hőmérséklet fizikai kutatási eszközt és eljárást alakítottunk ki, amelyek önmagukban külön-külön is újszerű technikai eredményt jelentenek. Közülük néhány: fém-üveg kriosztát és a hozzátartozó mérőegység; homogén szupravezető mágnesből és nagynyomású bombából álló kombi-



nált rendszer; szupravezető Helmholtz-tekercs; szupravezető tápegység; normál és kriogén tartományban egyaránt működő, nagy érzékenységu és stabilitásu hőmérséklet szabályozó; homogén szupravezető ötvözetek előállítása hangfrekvenciás rázás, illetve ultrahangos keverés útján.

7. Kidolgoztunk egy modellt a vortex mozgás során létrejövő flux creep állapotra, amely a vortex elmozdulással arányos erő felismerésén alapul. A II-es típusú szupravezetőkben külső elektromos áram hatására nem-egyensúlyi vortex eloszlás indukálódik, amelynek időben exponenciálisan való kiegyenlítődése hozza létre a flux creep-et. Termodinamikai módszerrel meghatároztuk az inhomogenitás időbeli változását és analitikus formulákkal írtuk le a jelenséget.

8. Abból az alapfeltevésből kiindulva, hogy különböző intenzitású pinningek vannak, és emiatt a vortexek egyik része már kötetlen, amikor a másik részük még kötött, elméleti modellt dolgoztunk ki, amely hűen leírja a kísérleti tényeket, és visszatükrözi a kétfajta kritikus áram, illetve flux-flow ellenállás létezését. Ezen túlmenőleg explicit formulát ad a flux-flow ellenállások, a kötött vortex sűrűség és a vortexek közötti maximális kölcsönhatási erő meghatározására. E relációkban közvetlenül mérhető mennyiségek szerepelnek.

A modellt a későbbiekben  $N$  különböző típusú pinning centrumra általánosítottuk, és megmutattuk, hogy ennek megfelelő számú vortex ellenállás és kritikus áram léphet fel.

9. A termodinamika elméletében elért eredményeinket alapul véve, megvizsgáltuk a szupravezetők mágneses állapotainak stabilitását. Ennek során először extenzív és intenzív paraméterekkel jellemeztük a fellépő energetikai, elektromos és mágneses kölcsönhatásokat, majd kiszámítottuk a vizsgált általános szupravezető teljes entrópia-sűrűségét, amely az összes lehetséges szupravezető effektust egy-egy additív taggal írja le.

10. A számítások során sikerült meghatároznunk az aktuális entrópia-mátrix és vezetési-mátrix elemeket is.

11. Ezután megadtuk a Meissner-, a flux creep- és a flux-flow állapot stabilitási kritériumait, továbbá a szükséges külső források nagyságát. Meghatároztuk a különböző állapotokhoz tartozó nem-egyensúlyi eltéréseket, termodinamikai erőket és áramokat, illetve az entrópia változásokat és az entrópia produkciókat. Új ismeretek birtokába jutottunk az instabilis flux jump állapot természetéről.

Az eredményeink által tartalmazott új információk jól kiegészítik az irodalomban már közzétett felismeréseket.

E kutatások során mindig a problémák sokoldalú vizsgálatára törekedtünk, és *kísérleti*, illetve *elméleti* módszereket egyaránt alkalmaztunk. Az elvégzett mérések előkészítése és lefolytatása pedig többféle *technikai* eredmény megszületésével járt együtt.

A dolgozatban követett *módszer* fő jellemvonásai a következőkben adhatók meg:

1. A felvetett kérdéseket komplex módon igyekeztünk vizsgálni: elméleti, kísérleti és egyes esetekben numerikus eljárásokkal.

2. Minden egyes problémánál az irodalmi tényanyag diszkussziójából indultunk ki.

3. Saját kutatási eredményeinket a rendelkezésre álló irodalmi ismeretekkel vetettük össze, és ahol lehetett, elméleti és kísérleti adatokkal ellenőriztük.



## I. rész

### A SZUPRAVEZETÉS ALAPVETŐ JELENSÉGEI

Röviden összefoglaljuk a szupravezetés leglényegesebb jelenségeit és a legfontosabb elméleti gondolatokat. Elsősorban azokra a motívumokra térünk ki, amelyekhez saját kutatásaink valamiképpen kapcsolódnak, illetve amelyek említése az egységes kép kialakításához okvetlenül szükséges. Célunk tehát az, hogy egy tömör és szemléletes áttekintést nyújtsunk, ami előkészíti az érdemi vizsgálatok leírását.

#### 1. I-es típusú szupravezetők

K. H. Onnes tiszta fémek (Pt, Au, Hg) elektromos tulajdonságainak hélium hőmérsékleteken történő vizsgálatakor [1] egyes anyagok elektromos ellenállásának eltűnését tapasztalta. Ma már 27 fémről, mintegy 1500 fémes ötvözetéről, illetve vegyületről tudjuk, hogy meghatározott  $T_c$  kritikus hőmérsékletnél szupravezetési tulajdonságokat vesznek fel:

$$\sigma = \infty \quad \text{azaz} \quad \rho = 0, \quad (1.1)$$

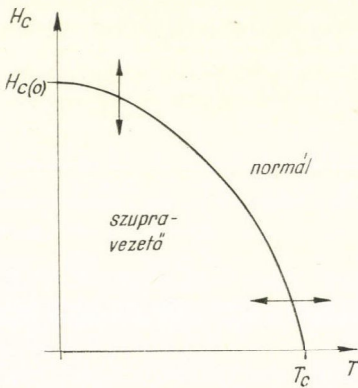
ahol  $\sigma$  az elektromos vezetőképesség,  $\rho$  az ellenállás. Újabb felismerések szerint nagy nyomáson a félvezetők egy része is szupravezetővé válik.

Meissner és Ochsenfeld [2] normál és szupravezető állapotban levő ón és ólom hengereken kimérte a mágneses jellemzőket. Azt tapasztalták, hogy ha a mintákat  $H$ -külső mágneses térben hűtik  $T_c$  alá, a mágneses mező hirtelen és (egy vékony felületi réteget kivéve) teljes mértékben kiszorul az anyagból. Ez a jelenség egészen az egyes anyagokra jellemző  $H_c$ -kritikus tér értékig fennáll.

A mágneses térnek az anyagból való eltűnésére két lehetőség kínálkozik: vagy  $H < H_c$  mellett  $T > T_c$ -ből  $T < T_c$  átmenet (az 1.1 ábrán vízszintes

nyíl), vagy  $T < T_c$  mellett  $H > H_c$ -ből  $H < H_c$  átmenet (az ábrán függőleges nyíl) megvalósítása.

Egyúttal megjegyezzük, hogy termodinamikailag a vízszintes nyíl mentén végrehajtott supra-normál átmenet másodrendű-, a függőleges mentén elsőrendű fázisátalakítással történik.



1.1 ábra

A  $H_c - T$  görbe jó közelítéssel leírható a

$$H_c(T) = H_c(0) \left( 1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right) \quad (1.2)$$

kvadratikus formulával, ahol  $H_c(0)$  a 0 K hőmérsékletéhez tartozó kritikus tér.

A Meissner-effektus eredményeként az anyagban uralkodó  $B$ -mágneses indukció

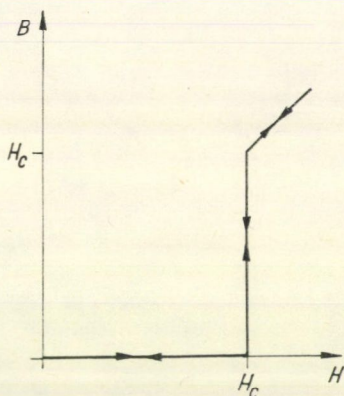
$$B = \mu H = 0, \quad (1.3)$$

amiből a  $\mu$ -permeabilitásra, illetve a  $\chi$ -szuszceptibilitásra

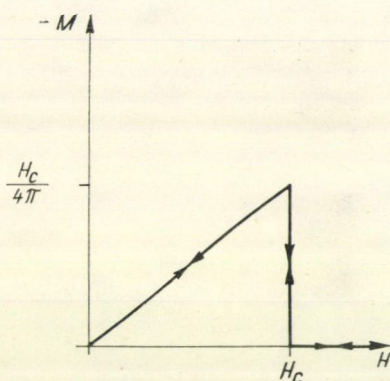
$$\begin{aligned} \mu &= 0 \\ \chi &= -\frac{1}{4\pi} \end{aligned} \quad (1.4)$$

adódik. Ez ideális (tökéletes) diamágnességnek felel meg, ami nem következik  $\sigma = \infty$ -ből, és az elektromos átalakulással ekvivalens értékű mágneses átalakulást jelent.

A szupravezető állapot  $B - H$ , illetve  $M - H$  mágnesezési görbéit az 1.2 és az 1.3 ábra szemlélteti, ahol  $M$  a mágneses momentum.



1.2 ábra



1.3 ábra

A tiszta szupravezetőkben az áram nem hatol be az anyagba, a térfogati áram értéke zérus, és csak felületi áram folyhat.

A szupravezetők elektrodinamikai tulajdonságainak első alapos elméletét  $F.$  és  $H. London$  alkották meg 1935-ben [6]. A két London-egyenlet

$$c \operatorname{rot} (A j_s) + H = 0 \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (A j_s) - \epsilon = 0 \quad (1.6)$$

közül az első az ideális diamágnességet, a második a végtelen vezetőképességet (zérus belső elektromos teret) reprezentálja. A formulákban  $c$  a fénysebesség,  $j_s$  a szupraáram sűrűsége,  $H$  a mágneses-,  $\epsilon$  az elektromos térerősség,  $t$  az idő,  $A$  pedig az anyagra jellemző skálár.



A mágneses tér behatolásának London-féle  $\lambda$ -értéke a  $\Lambda$  faktor segítségével kifejezhető:

$$\lambda = \frac{c^2}{4\pi} \Lambda = \frac{c^2}{4\pi} \frac{m}{ne^2}, \quad (1.7)$$

ahol  $n$  a  $\text{cm}^3$ -kénti elektron szám,  $m$  az elektron tömeg,  $e$  a töltés. A  $\lambda$  értéke tiszta fémekben  $10^{-6}$  cm nagyságrendű. Az egyenlet második része már *F. London* [7] erős, kvantummechanikai jellegű feltételezéséből származik, hogy a szupravezető állapotot olyan koherencia, vagy merevség jellemzi, amelynek eredményeként a hullámfüggvény mágneses tér hatására nem változik meg lényegesen.

*Pippard* [8] kísérleti eredmények analiziséből a London egyenletek nem-lokális módosítását javasolta, amely szerint az áramsűrűséget egy adott pontban nem a helyi, hanem a környezetre integrált vektorpotenciál adja meg:

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{r}) = -\frac{3}{4\pi c \Lambda \xi_0} \int \frac{\mathbf{R}[\mathbf{R}(\mathbf{r})]_e^{-R/\xi_0}}{R^4} dV, \quad (1.8)$$

ahol  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ,  $V$  a térfogat és a  $\xi_0$ -koherenciahossz értéke tiszta fémekben  $10^{-4}$  cm körül van, ami azt jelenti, hogy szupravezető állapotában az állapotfüggvény nagyszámú elektron koherenciáját jellemzi.

A termikus tulajdonságok leírásának első sikeres próbálkozása a Gorter—Casimir-féle [9] kétfolyadékos modell volt. A teljes  $\varrho_e$ -elektron sűrűsége, illetve  $\mathbf{j}_e$ -áramsűrűsége tett

$$\varrho_e = \varrho_n + \varrho_s \quad (1.9)$$

$$\mathbf{j}_e = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_s$$

feltételből ( $n$ =normál,  $s$ =szupra) kiindulva, képes volt visszaadni a fajhő ugrást és a specifikus hő  $T^3$ -al arányos mennyiségnek találta. Visszatükrözte a kritikus térre vonatkozó (1.2) relációt, és a kísérletekkel jól egyező formulát szolgáltatott a behatolási mélység hőmérséklet-függésére:

$$\lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{\sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^4}}. \quad (1.10)$$

Arra is utalt, hogy a kondenzált és nem kondenzált állapot energetikailag az abszolút nulla foknál sem fedi le egymást.

A termodinamikai vizsgálatok a klasszikus hőelmélet nagy sikerét jelentették. A  $\mathcal{G}$ -Gibbs függvény segítségével meghatározták a fázisátalakulásnál végzett munkát:

$$\mathcal{G}_n(H) - \mathcal{G}_s(0) = \frac{H_c^2}{8\pi}, \quad (1.11)$$

ahol az egyenlet jobb oldala egyben az  $M-H$  görbe alatti területet is jelenti. Kiszámították az entrópia különbséget

$$\Delta S = S_n - S_s = -\frac{1}{4\pi} H_c \frac{dH_c(T)}{dT} > 0 \quad (1.12)$$



amiatt, mert  $(dH_c(T)/dT) < 0$ , ami egyben a szupravezető állapot rendezettebb (kondenzált) jellegére is rámutat. (1.12)-ből a fajhő-különbség is meghatározható:

$$\Delta C = C_n - C_s = -\frac{1}{4\pi} T \left[ H_c \frac{d^2 H_c}{dT^2} + \left( \frac{dH_c}{dT} \right)^2 \right]. \quad (1.13)$$

Az izotóp-effektus felfedezése [10] [11] arra utalt, hogy az elektron-rács kapcsolat, vagyis az elektron-fonon kölcsönhatás alapvető szerepet játszik a szupravezetés létrejöttében. A kísérleti tapasztalatok egyezésben vannak Frölich [12] elméleti meggondolásával, és a

$$T_{ci} M_i^{\frac{1}{2}} = \text{Konst} \quad (1.14)$$

alakban foglalható össze, ahol  $M_i$  az izotóp tömege.

Egyes későbbi mérések [13], [14] pl. az alacsony  $T_c$ -jú ruthenium és osmium esetében viszont nem igazolták az (1.14) összefüggést.

H. London [15] és mások nagyfrekvenciás abszorpciós méréseinek eredményei, továbbá Goodman [16] és munkatársai, illetve mások által kísérletileg a szupravezető fajhőre talált exponenciális hőmérsékletfüggés jól magyarázható az elektronállapot sűrűségben fellépő

$$\varepsilon = \hbar \nu \sim k T_c \quad (1.15)$$

szélességű energia-hézag feltételezésével. (Itt  $h$  a Planck-,  $k$  a Boltzmann-állandó,  $\nu$  a frekvencia.)

Az izotóp effektus és az energia-hézag egyaránt nagy fontosságot nyert a szupravezetés alapvető kvantummechanikai elméletében, a Bardeen—Cooper—Schrieffer-[4] féle mikroszkopikus modellben. Eszerint a szupravezetésért a két-két elektron közötti virtuális fonon-csere következtében fellépő elektron-párképző kölcsönhatás a felelős. A  $\mathbf{k}_1$  hullámszám vektorral jellemzett elektron kibocsát egy  $\mathbf{q}$  hullámszámú virtuális fonont, amely a  $\mathbf{k}_2$  hullámszám vektorú elektronon elnyelődik, és létrejön a  $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}$  és  $\mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}$  szórási folyamat. Ez a kölcsönhatás vonzó (negatív) jellegű, ha az energiákra fennáll, hogy

$$|\varepsilon_{k_2} - \varepsilon_{k_2 + q}| < \hbar \omega_q, \quad (1.16)$$

illetve

$$|\varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_1 - q}| < \hbar \omega_q,$$

ahol  $\omega_q$  a fonon frekvencia. Szupravezetés akkor jön létre, ha ez a vonzó fonon-kölcsönhatás felülmúlja a taszító jellegű árnyékolt Coulomb-kölcsönhatást.

A szupravezető és normál fázis közötti energia különbséget a fonon-kölcsönhatás és a Coulomb-kölcsönhatás együtt hozza létre. A többi kölcsönhatás a normál és a szupra állapotban ugyanaz, emiatt az energia különbségben nincsen szerepük.

Az elméletben a normál állapotot a Bloch-féle független részecske modell írja le. A szupravezető alapállapot hullámfüggvényét az alacsonyan fekvő állapotok hullámfüggvényeinek lineáris kombinációjaként állították elő.

Az elektronok Hamilton-operátora a következő alakban írható fel:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2, \quad (1.17)$$

ahol  $\mathcal{H}_0$  a kölcsönhatás mentes Bloch-modellt,  $\mathcal{H}_1$  a Coulomb-kölcsönhatást,  $\mathcal{H}_2$  a fonon-kölcsönhatást tartalmazza. A  $\mathbf{k}$  hullámszám vektorú és  $\sigma$  spinű Bloch-álla-



potokhoz tartozó  $c$ -abszorpció és  $c^+$ -emissziós operátorok segítségével

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, \sigma_1, \sigma_2, q} \frac{2\hbar\omega_q |\mathcal{M}_q|^2 c^+(k_1 - q, \sigma_1) c(k_1, \sigma_1) c^+(k_2 + q, \sigma_2) c(k_2, \sigma_2)}{(\varepsilon_{k_2} - \varepsilon_{k_2+q})^2 - (\hbar\omega_q)^2}, \quad (1.18)$$

ahol  $\varepsilon_k$  a Bloch-állapotoknak a Fermi-nívótól számított energiája, és  $\mathcal{M}_q$  a kölcsönhatás mátrix-eleme:

$$|\mathcal{M}_q|^2 = v_q^2 \frac{\hbar}{2\omega_q}.$$

$\mathcal{H}_1$ -et  $\mathcal{H}_2$ -vel hasonló alakúra hozva, megmutatható, hogy a szupravezető hullámfüggvény szempontjából fontos mátrix-elemekre fenn kell hogy álljon a

$$-\mathcal{V} \equiv \left\langle -\frac{2|\mathcal{M}_q|^2}{\hbar\omega_q} + \frac{4\pi e^2}{q^2} \right\rangle < 0 \quad (1.19)$$

reláció.

A tényleges kölcsönhatási energia kiszámításánál a  $[k_1, \sigma_1; k_2, \sigma_2]$  két-elektront a  $[k'_1, \sigma'_1; k'_2, \sigma'_2]$  állapotba átvivő

$$C = c^+(k'_2, \sigma'_2) c(k_2, \sigma_2) c^+(k'_1, \sigma'_1) c(k_1, \sigma_1) \quad (1.20)$$

operátor játszik szerepet, amelynek tetszőleges sokelektron konfigurációkat összekötő elemei a Fermi—Dirac-statisztika miatt változó előjelűek, tehát nagyon kicsi energiaérték adódnék. Azonban az elektronok között erős korrelációt feltételezve, egy koherens, alacsonyan fekvő állapotot képezhetünk oly módon, hogy olyan konfiguráció sorozatot választunk ki, ahol a Bloch-állapotok páronként vannak betöltve. (Ha tehát a  $k_1, \sigma_1; k_2, \sigma_2$  állapotpár egyik állapota be van töltve, akkor a másik is.) Az ilyen sorozat tagjait összekötő mátrix-elemek mind negatívak.

Mivel a kölcsönhatás során az összipulzus megmarad, tehát az egyes párok impulzusa nem változik

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 = \mathbf{K} \quad (1.21)$$

maximális számú mátrix-elemet akkor kapunk, ha  $\mathbf{K}$  minden elektronpárra nézve ugyanaz. Alapállapotban a választás  $\mathbf{K}=0$ , tehát a betöltött állapotpárok  $\mathbf{k}\uparrow$  és  $\mathbf{k}\downarrow$  lesznek. Ezek az ún. Cooper-párok [17]. Ugyanakkor ellentett spinű állapotokat véve, a kicserélődési tag csökkenti a kölcsönhatási energiát.

A szupravezetők alapállapota (illetve állapotfüggvénye) tehát ellentétes impulzusú és spinű, virtuálisan gerjesztett elektronpárokat tartalmazó normális állapotok (illetve állapotfüggvények) lineáris kombinációjaként áll elő, és energetikailag a normál állapotnál mélyebben fekszik. A szupravezetés tehát erősen korrelált állapotot jelent. Az elektronok az impulzus térben, a Fermi-felület környezetébe eső vékony rétegben teljesen betöltik a párállapotokat. A szupravezető és normál állapot energia-különbsége  $T=0$  K-on:

$$\Delta E_0 = -\frac{2N(0)\hbar^2\omega_q^2}{e^{N(0)\mathcal{V}} - 1}, \quad (1.22)$$

ami összhangban van az izotóp-effektussal. (Itt  $N(0)$  a Fermi-energiánál vett átlagos állapot-sűrűség,  $\mathcal{V}$  a negatív előjellel ellátott kölcsönhatási mátrix-elem, tehát szupravezetésnél  $\mathcal{V} > 0$ .)



Empirikusan, nagyságrendileg  $\Delta E_0 \sim N(0)kT_c^2$  és általában  $kT_c \ll \hbar\omega_q$ , tehát (1.22)-ben  $N(0)\psi < 1$ , vagyis a gyenge csatolás határesetét kell tekintetbe venni. Ekkor viszont

$$\Delta E_0 = -2N(0)(\hbar\omega_q)^2 e^{-\frac{2}{N(0)\psi}} = -\frac{1}{2} \frac{n_c^2}{N(0)}, \quad (1.23)$$

ahol  $n_c$  a páronként a Fermi-felület fölé gerjesztett elektronok száma.

Kiszámítható a fellépő energia-hézag is, azaz a minimális gerjesztési energia, amelyre  $T=0$  K-on

$$2\varepsilon_0 \approx 4\hbar\omega_q e^{-\frac{1}{N(0)\psi}} \quad (1.24)$$

összefüggés adódik.

A gerjesztett állapotok vizsgálatánál különbséget kell tenni az egyesével gerjesztett részecskék és a gerjesztett valódi párállapotok között. Az előbbi azt jelenti, hogy a  $[\mathbf{k}\uparrow, \mathbf{k}\downarrow]$  állapotpárból csak az egyik állapot van betöltve. Ez úgy képzelhető el, mintha az alapállapothoz hozzáadnánk egy elektront, amely páratlan lesz, és  $\varepsilon_0$  energiával a Fermi-nívó felett helyezkedik el. Másrészt viszont ahhoz, hogy egy párt felszakítsunk, legalább  $2\varepsilon_0$  energia szükséges. Tehát a  $2\varepsilon_0$  hézag mindenképpen megjelenik.

Az egyesével gerjesztett részecskéket Bloch-szerűen vesszük figyelembe. Ezek a kölcsönhatási energiához csak elhanyagolhatóan járulnak hozzá, de lecsökkentik a párok rendelkezésére álló fázisteret. Ezért az egyesével elfoglalt párállapotokat a kölcsönhatási energia számításánál nem kell figyelembe venni, hanem csak a fennmaradó állapotok alkalmazandók.

Eszerint tehát a szupravezető rendszer egy gerjesztett állapotát oly módon képezhetjük, hogy rögzítjük, melyik állapotokban foglalnak helyet egyes elektronok és melyekben alapállapotú párok. A fennmaradó állapotok állnak a gerjesztett párok rendelkezésére.

Azok az állapotfüggvények, amelyekben az egyes részecskék és a gerjesztett párok eloszlása különböző, ortogonálisak egymásra és az ilyen függvények összessége a gerjesztett állapotok teljes rendszerét adja.

A BCS-elmélet fontosabb eredményei a tapasztalati tényekkel jó egyezésben vannak. A kritikus hőmérsékletet a

$$kT_c = 1,14\hbar\omega_q e^{-\frac{1}{N(0)\psi}} \quad (1.25)$$

formula adja meg, amelyből látható, hogy gyenge csatolás esetén, amikor  $T_c \sim \omega_q$ , az  $\omega_q \sim \frac{1}{\sqrt{M_i}}$  miatt  $T_c \sim \frac{1}{\sqrt{M_i}}$ , ahogyan az izotóp-effektus kívánja. Az energia-hézag  $T=0$  K-on

$$2\varepsilon_0 = 3,52 kT_c, \quad (1.26)$$

és  $2\varepsilon \rightarrow 0$ , amikor  $T \rightarrow T_c$ -hez. Ezt a függést a  $T_c$  közelében az

$$\varepsilon(T) = 3,2 kT_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.27)$$

reláció reprezentálja. Az a tény, hogy  $T_c$ -nél az energiahézag eltűnik, jól mutatja, hogy ez a fázisátalakulás másodrendű. A kritikus mágneses télerősségről  $T=0$  K-nál a



$$H_c(0) = 1,75 [4\pi N(0)]^{\frac{1}{2}} kT_c \quad (1.28)$$

összefüggés ad számot, a tér hőmérséklet-függését pedig  $\frac{T}{T_c} \ll 1$  esetén a

$$H_c^2 = H_c(0)^2 \left[ 1 - \frac{2}{3} \pi^2 \left( \frac{kT}{\varepsilon_0} \right)^2 \right], \quad (1.28')$$

vagy a

$$H_c \approx H_c(0) \left[ 1 - 1,07 \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \right]$$

formula szemlélteti.

Az elektrodinamikai tulajdonságok vizsgálata arra utal, hogy a Meissner-effektus  $\varepsilon \neq 0$  esetén mindig fellép. Az áramsűrűség (1.8)-hoz hasonlóan írható le. A  $\xi$ -koherencia hossz mikroszkópikus adatokkal kifejezhető:

$$\xi = \frac{\hbar v_F}{\pi \varepsilon_0(0)} = 0,18 \frac{\hbar v_F}{kT_c}, \quad (1.29)$$

ahol  $v_F$  a Fermi-felületen levő elektronok sebessége.

Ügyszintén a tapasztalattal egyezésben (és a két-folyadék modellnek megfelelően) jellemzi a behatolási mélység  $T$ -függését, és visszatükrözi a fajhő exponenciális  $T$ -függését is.

## 2. II-es típusú szupravezetők

Az eddigiekből kitűnik, hogy mágneses szempontból az I-es típusú (vagy elemi, illetve tiszta) szupravezetők a kis kritikus terekig ( $\sim$  néhány száz oersted) fennálló belső térmentességgel, azaz a

$$\lambda < \xi \quad (1.30)$$

egyenlőtlenséggel jellemezhetők. Ezzel szemben a II-es típusnál még általában nagy külső tér sem rontja le a szupravezető képességet, és

$$\lambda > \xi \quad (1.31)$$

miatt a mágneses mező behatol az anyagba. Emiatt a másodrendű szupravezetők-nél különböző szerepű kritikus mágneses terek lépnek fel (lásd 1.4 ábra):

1.  $0 < H < H_{c1} < H_c$ : ideális szupravezetés,  $B=0$ -val jellemzett Meissner-effektus, és  $H_{c1}$  kisebb, mint a

$$\mathcal{G}_n(T) - \mathcal{G}_s(T) = \mathcal{F}_n(T) - \mathcal{F}_s(T) = \frac{H_c^2(T)}{8\pi} \quad (1.32)$$

egyenlettel definiált termodinamikai kritikus tér.

2.  $H = H_{c1}$ -nél a mágnesezettség hirtelen megváltozik és megkezdődik a külső mágneses tér behatolása az anyagba.

3.  $H_{c1} < H < H_{c2}$ : kevert állapot, amelynél  $B < H$ , szupravezető és normál tartományok egyidejű fellépése; a részleges diamágnesség  $H_{c2}$ -ig való folytatódása.

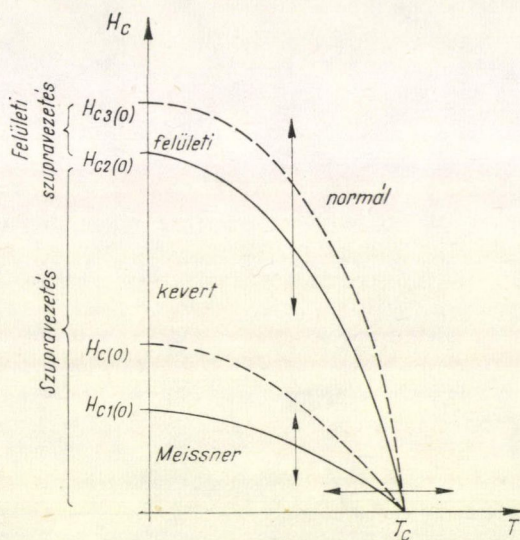
4.  $H = H_{c2}$ -nél beáll a  $B = H$  normál állapot;

5. kivéve egy vékony felületi réteget [18], amely egészen  $H_{c2} < H < H_{c3}$ -ig szupravezető marad, ahol

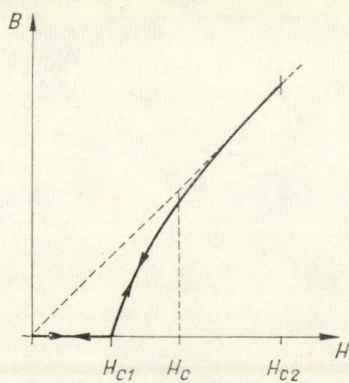
$$H_{c3} = 1,695 \frac{\hbar c}{2e\xi(T)} = 1,695 H_{c2}. \quad (1.33)$$

Az 1.4 állapot-ábrán bejelölt mindhárom nyíl másodrendű fázisátalakulást jellemez.]

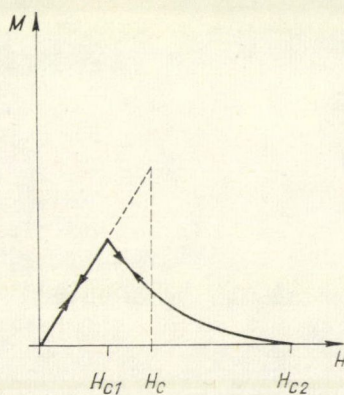
Az ezen ábrának megfelelő mágnesezési jelleg-görbéket az 1.5 és 1.6 grafikon szemlélteti.



1.4 ábra



1.5 ábra



1.6 ábra



A II. típusú szupravezetők általános modelljének kidolgozása a Landau-féle fázisátalakulási elmélet [19] alapján Ginzburg és Landau nevéhez fűződik [3]. E szerint mágneses tér jelenlétében a szupravezető elektronok szabadenergiája

$$\mathcal{F}_s(H) = \mathcal{F}_s(0) + \alpha(T)|\psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m} \left| \left( -i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}A \right) \psi \right|^2 + \frac{H^2}{8\pi}, \quad (1.34)$$

ahol a  $\psi$  rendeződési paraméter hullámfüggvény tulajdonsággal rendelkezik és így  $|\psi|^2 = n_s$ , és  $A$  a vektorpotenciál:  $\text{rot } A = H$ . A  $\psi$ -függvény itt egyben az energia-hézagot is jellemzi. Ezen összefüggés  $\psi$ , illetve  $A$  szerint való minimalizálása szolgáltatja a II. típusú szupravezetők elméletének alapját képező

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}A \right)^2 \psi = 0, \quad (1.35)$$

illetve

$$j_s = \frac{e\hbar}{2im} (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{4e^2}{mc} |\psi|^2 A = \frac{c}{4\pi} \text{rot } H \quad (1.36)$$

Ginzburg—Landau-egyenleteket, amelyek közül az első a mágneses térben fellépő rendeződés, a második a lokális szupravezető áram nagyságának meghatározását teszi lehetővé. Az  $\alpha(T)$  és  $\beta(T)$  sorfejtési koeficiensek a BCS elmélet alapján [20] kiszámíthatók.

A GL egyenletek a II-rendű szupravezetésen túlmenő információkat is tartalmaznak, és pedíg

1. ha  $\psi = 0$ , akkor a normál állapotot,

2. ha  $\psi = \psi_0 = \text{konstans} = |\alpha/\beta|^{\frac{1}{2}}$ , akkor a I. típusú szupravezető állapotot jellemzik, amely esetben

$$j_s = -\frac{4e^2}{mc} |\psi_0|^2 A, \quad (1.37)$$

ami megfelel a London-egyenletnek. Továbbá a  $T_c$  közelében érvényes

$$H_c^2 = 4\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \quad (1.38)$$

reláció is kiadódik.

A  $\psi$  variációja számára a  $\xi(T)$  jelent egy természetes hossz mértéket

$$\xi^2(T) = \frac{\hbar^2}{2m\alpha(T)}, \quad (1.39)$$

míg a behatolási mélység

$$\lambda^2(T) = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \psi(T)^2} \quad (1.40)$$

alakban fejezhető ki. Ezek segítségével a GL elmélet egy hasznos, új paramétert vezet be, amely egyben a kritikus mágneses terek közötti kapcsolatot is jellemzi:

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{mc}{2eh} \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)} = \frac{H_{c2}}{\sqrt{2}H_c}. \quad (1.41)$$



Ha  $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$ , a szupravezetés I-es típusú,  $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$  a  $H_{c2} = H_c$  egyenlőséget fejezi ki,  $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$  pedig a II-es típusú szupravezetésre utal.

A kevert állapotban,  $H_{c1}$  és  $H_{c2}$  között az anyag periodikus szerkezetűvé válik. Olyan, egymástól megkülönböztethető fonalakra bomlik fel, amelyekben a mágneses tér értéke maximális, míg a közöttük levő részekben kisebb, illetve onnan teljesen kizorul. A külső tér irányában nézve a mintában mágneses örvények alakulnak ki, amelyek örvényfonalak alakjában behálózják az egész munkaanyagot. Az örvények középvonalában az állapot normál, másutt szupravezető. Ez az elrendeződés egy rácsszerkezetet alakít ki, amelynek elméletét *Abrikoszov* [21] adta meg.

Ha a külső tér értéke majdnem  $H_{c2}$ , akkor a II. típusú szupravezetőt jellemző  $|\psi|$  kicsi és a lokális  $H$  közelítőleg konstans. Elhanyagolva a  $|\psi|^2 \psi$ -t tartalmazó tagot az (1.35) első  $GL$  egyenlet lineárisává válik és formailag megegyezik a  $2e$  töltésű részecskét leíró Schrödinger-egyenlettel. A megoldás periodikus jellegéből következik a fluxus fonal rács létezése a szupravezetőben. A  $\psi$  és  $A$  közelítő megoldása számára alkalmazott iterációs eljárás során a mágneses indukció meghatározása is lehetővé vált

$$B = H - \frac{H_{c2} - H}{\gamma(2\kappa^2 - 1)}, \quad (1.42)$$

ahol  $\gamma = |\psi|^4/|\psi|^2$ . A szabad-energia akkor minimális, ha  $\gamma$  értéke a legkisebb. Ez négyzetes rács esetén 1,18 háromszögű rácsra pedig 1,16, ezért az utóbbi a kedvező. Létezését kísérleti eredmények [22], [23], [24] is megerősítik.

A mágneses vortex koncepció és a vortexek tulajdonságai a  $GL$  egyenletek közvetlen folyományai. A  $\psi$  függvény jellemzői azonban egy szál környezetében nagyon hasonlítanak a szuperfolyékony héliumbeli, Feynman-féle  $\psi$  viselkedéséhez [25]. (Ennek eredete *Onsager* [26] azon feltételezése, amely szerint a szuperfluid cirkuláció kvantálható a vortex fonalak környezetében.)

A  $\psi$  rendeződési paraméter eltűnik a vortex-szál centrumában és fázisa  $2\pi$ -vel változik meg a szingularitás körüljárásakor. Továbbá, a nagy  $\kappa$ -jú szupravezetőknél egy izolált szál körüli szupra-elektronok sebessége  $1/r$  szerint csökken, akárcsak egy szuperfolyadék esetében.



## II. rész

### IRODALMI ÖSSZEFOGLALÁS

#### 1. Mágneses szennyezések

A különböző rácsszerkezet tökéletlenségek hatást gyakorolnak a szupravezetői állapotra [27] és megváltoztatják annak jellemző paramétereit.

A szupravezető anyagba bevitt diamágneses és paramágneses szennyezések folytán változás áll be a kritikus hőmérséklet és a kritikus mágneses tér, illetve terek értékében. A paramágneses szennyezők hatására általában csökken a  $T_c$ , és körülbelül 1 %-os paramágneses anyag koncentráció [28] már szétrombolja a szupravezető állapotot. A diamágneses szennyezők lényegesen kisebb hatást gyakorolnak, és vannak esetek, amikor csökkentik, máskor viszont növelik a kritikus hőmérsékletet [29].

Csak a szórási mechanizmus megváltozását véve figyelembe (és a Fermi-felület topológia változását elhanyagolva), *Abrikosov* és *Gorkov* [30] alkotta meg az első sikeres szennyezési elméletet. Ez az elektronoknak a mágnesesen aktív szennyező atomok lokalizált spinjein történő szórásán alapul.

Módszerüket Green-függvényes technikával alakították ki és  $T_c$ -re a

$$\lambda^* v_0(\epsilon_F) \operatorname{Re} \int_0^{\omega_D} \frac{th \frac{\omega}{2T_c}}{\omega + i\Gamma_s} d\omega = 1 \quad (2.1)$$

alakú kifejezést kapták, ahol  $\lambda^*$  az elektron-elektron kölcsönhatás effektív potenciálja,  $v_0(\epsilon_F)$  a tiszta fém normál egy-elektron állapotsűrűsége a Fermi-felületen,  $\Gamma_s$  a spin-flip szórás nagysága a Fermi-felületnél és  $\omega_D$  a Debye-frekvencia.

Megmutatták azt is, hogy a mágnesesen szennyezett szupravezetők energia hézag hiányában is megtarthatják szupravezetési tulajdonságaikat. Ezt Reif és Woolf tunnel kísérletekkel kvalitatíve igazolta [31].

A diamágneses szennyezők hatásának leírására kétféle mechanizmust javasoltak. *Kadanoff* és *Markowitz* [32] az elektron-elektron kölcsönhatásban fellépő anizotropia csökkenést, *Barjahtar* et al [33] pedig a Fermi-felület topológiájának megváltozását tekintette alapvetőnek.

A para- és diamágneses szennyezések együttes leírására egy lehetőséget a normál egy-elektron állapot sűrűségben fellépő szingularitás felismerése biztosít. Ez *I. M. Lifsic* [34] nevéhez fűződik.

Korábbi vizsgálatok [35], [36] megállapították, hogy tallium esetében, kis deformációknál  $T_c$  nemlineárisan függ a külső  $P$ -nyomástól. A nyomás és mágneses szennyezések együttes hatásaként pedig azt találták, hogy a  $dT_c/dT$  mennyiség a szennyezés koncentráció szerint maximumot mutat [37], [38]. E jelenség elméleti



vizsgálatát [39] a Fermi-felület topológiájának megváltozására alapozták, ami a rheniumon végzett további kísérletekkel [40] összhangban volt.

Ezek alapján *Barjahtar et al* [41] vizsgálatot végeztek annak megállapítására, hogy a külső befolyás eredményeként létrejövő topológia változás milyen hatást gyakorol a szupravezetési átmenet jellemzőire. Azt találták, hogy  $T_c$  az alábbi módon függ a Fermi-energiától:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^0} \approx \frac{1}{\varrho_0} \left( \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_k}{2T_c} \right)^{\frac{1}{2}} \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_k), \quad (2.2)$$

ahol  $T_c^0$  BCS elméletben szereplő kritikus hőmérséklet,  $\varepsilon_F$  a Fermi-energia,  $\varepsilon_k$  azon energiaérték, amelynél a topológia változás bekövetkezik,  $\theta$  egy lapos függvénye az argumentumnak  $\varrho$ -ra pedig a

$$\varrho_0 = \lambda^{*2} J(0, 0) v_0(\varepsilon_F) \quad (2.3)$$

reláció áll fenn. Itt  $\lambda^*$  a kölcsönhatási konstans,  $J$  az elektron-elektron vonzás effektív potenciálja,  $v_0$  az eredeti állapot sűrűség.

Elvégezték a kapott eredmények összehasonlítását a rheniumra nyert kísérleti adatokkal, és azzal kielégítő egyezést kaptak, amely szerint

$$\varepsilon = \varepsilon_k + 2T_c \text{-nél } \frac{\delta v}{v} \approx 10^{-2}$$

és

$$\frac{\partial(\varepsilon_F - \varepsilon_k)}{\partial P} \approx 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{k bar}}.$$

Emellett a tunnel jellemzőkre és a hőtágulási koefficiensre gyakorolt hatást is megvizsgálták.

A kevert állapot dinamikus tulajdonságainak leírására *Caroli* és *Maki* [42], [43] által kifejlesztett módszerben a szupravezetési  $\psi$ -rendparaméter perturbációként szerepel a  $H_{c2}$  közelében, a normál állapot pedig perturbálatlan alapállapotként. *Kadanoffnak* és *Falkonak* [44] a szupravezetőkben történő ultrahang csillapodás vizsgálatára kidolgozott eljárását kiterjesztve, tiszta és szennyezett II. típusú szupravezetők kevert állapotában létrejövő rendparaméter oszcillációs időfüggését vizsgálták. Két kollektív módus fellépését jósolták meg: transzverzális, amely az áram oszcillációhoz és longitudinális, amely a sűrűség oszcillációhoz kapcsolódik. A transzverzális módus a felületi ellenállás anizotrópiáját okozhatja. A mikrohullámú kísérletekkel [45], [46] ez csak durva kvalitatív egyezést mutat.

*Schmid* a GL egyenletek időfüggő modifikációját vezette be [47] és ezzel meghatározta a vortex mozgáshoz tartozó ellenállást. *Kulik* [48] egy másfajta időfüggő modifikációval a GL egyenletet hullám egyenletként alkalmazta, azonban kapott eredményei csak az I-es típusú szupravezetőkéről adtak bizonyos információkat nagyon alacsony hőmérsékleteknél. *Caroli* és *Maki* [49] viszont széles hőmérséklet tartományban a kritikus tér közelében is helyesen tudta leírni mind a tiszta, mind a szennyezett szupravezetők mágneses tulajdonságait.

A szupravezetők normál állapotban vagy para- vagy diamágnesesek nagyon kis  $\chi_n$ -szuszeptibilitással. Ez alacsony tereknél általában elhanyagolható. Azonban



e kis szuszeptibilitások igen nagy hatást váltanak ki a nagy terű (és magas  $T_c$ -jű) szupravezetőknél. Ugyanis az elektron spineknek a külső  $H$ -tér irányába való rendeződése az egységnyi térfogatra eső Gibbs-függvényben

$$\Delta\mathcal{G}_{ns} = \frac{1}{2} \chi_n H^2 \quad (2.4)$$

változást idéz elő, amely magas tereknél összemérhetővé válik a gap energiával. Minthogy mágneses térrel a normál állapot  $\mathcal{G}$ -je csökken, a szupravezetőé növekszik Clogston [50] és Chandrasekhar [51] megmutatta, hogy létezik egy olyan  $H_p$  térerősség, amelynél a normál állapot kisebb  $\mathcal{G}$ -vel rendelkezik, mint a szupravezető állapot zérus térben. Eszerint, ha a normál  $\chi_n$  kizárólag a Pauli-féle paramágnesességnek köszönhető, akkor

$$H_p(0) = \sqrt{\frac{2}{\chi_n} \Delta\mathcal{G}_{ns}} = 1,86 T_c. \quad (2.5)$$

amit Clogston-limitnek szokás nevezni.

A kísérleti tények azt mutatták, hogy a felső kritikus tér, vagy az ismert

$$H_{c2} = \sqrt{2} \times H_c = \frac{\Phi_0}{2\pi\zeta^2} \quad (2.6)$$

formulával megadott értékhez, vagy (2.5)-höz tart, amik lényegesen különböznek egymástól.

Fulde és Ferrell szerint [52] a rendszer „depairod” szupravezető állapotba kerülhet, amelynél a párok összipulzusa nem zérus. A depairod-szupravezető átmenete elsőrendű, viszont a depairod-normál átmenetet másodrendűnek kell tekinteni.

Maki [53] bevezetett egy  $\alpha = \sqrt{2} H_{c2}(0)/H_p(0) = 2,36 \cdot \gamma \cdot \varrho_n$  paramétert, amelyben  $H_p(0)$  a (2.5)-el,  $H_{c2}(0)$  pedig a (2.6)-tal van megadva, és megmutatta, hogy a paramágnesesen limitált felső kritikus teret másodrendű fázisátmenet esetén a

$$H_{c2}^*(0) = 1,31 \cdot T_c \cdot \alpha \cdot (1 + \alpha^2)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

formulával lehet meghatározni, ahol  $\gamma$  az elektron fajhő Sommerfeld-koefficiense,  $\varrho_n$  a maradék ellenállás.

A további finomítások a fluxus fonalak normál törzsének paramágnesességét és a Cooper-párok széttörésére törekvő spin-pálya szórást veszik figyelembe, amelyek növelik a szupravezető állapotbeli paramágnesesség hatását.

A magas  $T_c$ -jű és  $H_{c2}$ -jű anyagokat általában magas  $\gamma$  és  $\varrho_n$ , illetve  $\alpha$  jellemzi, ekkor viszont  $\alpha(1 + \alpha^2)^{-\frac{1}{2}} \rightarrow 1$ . Ily módon a paramágnesesen limitált felső kritikus tér maximális értéke

$$H_{c2}^*(0)_{\max} = 1,31 \cdot T_c, \quad (2.8)$$

így az egyes értékek összevetése lehetséges.



A Clogston-limit egyenlet mindig magasabb értéket szolgáltat, mint a Maki-limit egyenlet. A jelzett magas paraméterű szupravezetőknél a kísérleti értékek (2.5)-nek általában 70–80%-át adják.

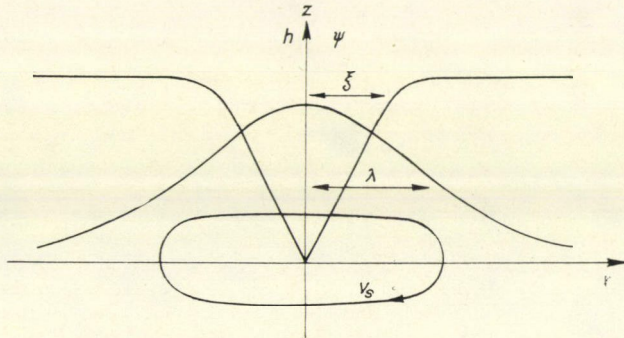
A (2.8) formula által jellemzett  $H_{c2}(0)_{\max}$  tér értékek sok esetben jó egyezést adnak a mérésekkel, jelezve ezen összefüggés fontosságát a magas  $T_c$ -jú és  $H_{c2}$ -jú szupravezetőknél.

A  $B_1(\text{NaCl})$  típusú vegyületeknél  $H_{c2}(0)$  számított értékei lényegesen alacsonyabbak a paramágneses limitnél és a megfigyelt adatokhoz közel esnek. Eszerint ennél a fajta vegyületnél a paramágneses hatás nem jelentős. A viszonylag magas  $T_c$ -ket itt nagyon alacsony  $\gamma$ -k kísérik.

Az átmeneti fémötvözetek a paramágneses hatást illetően hasonlítanak az A15 vegyületekhez. A  $H_{c2}(0)_{\max}$  a legtöbb esetben alábecsült érték a tényleges kritikus mágneses térhez viszonyítva. Ez arra utal, hogy jelen esetben a spin-pálya szórás növeli a szupravezető kevert állapot paramágneses szuszceptibilitását. Ez nem meglepő, ha figyelembe vesszük, hogy ezen ötvözetek ellenállása magasabb, mint a vegyületeké, ami a bennük rejlő rendezetlenségnek köszönhető.

## 2. A vortexek tulajdonságai

A vortexek mikroszkopikus szerkezetét a 2.1 ábra szemlélteti a  $\psi$  rendeződési paraméter és a  $h$  lokális mágneses tér változása alapján. A vortex középpontból kiindulva,  $\psi$  monoton növekszik egy konstans  $\psi_0$  értékig, amely  $\xi$ -koherencia hosszánál nagyobb  $r$ -távolságnál áll elő. A mágneses tér maximális a centrumban, és csökkenően terjed ki  $\lambda$ -behatolási mélységnek megfelelő távolságokig.



2.1 ábra

Caroli et al. [54] modellje szerint a vortex  $\xi$  sugarú, normál elektronok által létrehozott törzsből áll, amely körül szupraáram folyik.

Hengeres szimmetriát feltételezve  $\psi = u(r)e^{in\varphi}$ , ahol  $n$  egész szám,  $\varphi$  pedig a forgási szög. Az  $u(r)$  kis  $r$ -ek számára (ha  $\xi \sim r$ )  $r$  csökkenésével lineárisan csökken és eltűnik, ha  $r \rightarrow 0$ , viszont  $\psi_0$ -hoz tart, ha  $r > \xi$ . Ebből az

$$\int_F \mathbf{h} d\mathbf{f} = n \frac{hc}{2e} = n\Phi_0 \quad (2.9)$$



fluxus kvantálási feltétel adódik, ahol  $\Phi_0 = 2,07 \cdot 10^{-7}$  gauss  $\text{cm}^2$  a mágneses fluxus kvantum, amelynek létezését kísérletileg közvetlenül is igazolták [55], [56]. Minden egyes vortex fonal éppen a  $\Phi_0$  elemi fluxust birtokolja.

A vortex vonal törzsének vizsgálatánál fel kell használni azt a tényt, hogy a megadott pontbeli áramsűrűség függ a pontot szegélyező  $\xi$  nagyságú tartományban uralkodó mágneses tér értéktől. A törzs tartományának leírását a *Bardeen—Stephen*-modell [57] szolgáltatja. Eszerint a vortex fonal törzsénél a szuperfluid áram sűrűség  $J_s \rightarrow 0$ , amikor  $v_s \rightarrow v_{sc}$ , ahol  $v_{sc}$  egy kritikus sebesség. Az  $r_t$  törzssugár az a távolság lesz, amelynél  $v_s = v_{sc}$  és  $\psi = 0$ . Egy izolált vortexre ( $H < H_{c2}$ -nél) az adódik, hogy

$$r_t = \frac{\hbar}{2mv_{sc}}, \quad (2.10)$$

amelynek  $H_{c2}$ -vel való kapcsolatát [58] a

$$H_{c2} = \frac{4e\lambda^2 H_c^2}{\hbar c} = \frac{\hbar c}{2er_t^2} \quad (2.11)$$

összefüggés szemlélteti. *Maki* [53] kis szabad úthosszal rendelkező ötvözeteket vizsgálva, az  $r_t$  kritikus sugárra, amelynél  $\psi \rightarrow 0$ , az általa kapott reláció megerősíti (2.11)-et.

Két-két vortex kölcsönhatásának jellemzésére az egyik középpontjában a másiktól származó  $h_{12} = h_{21}$  mágneses teret vezethetjük be

$$h_{12} = h_{21} = h_1(\mathbf{r}_2) = h_2(\mathbf{r}_1) = \frac{\varphi_0}{2\pi\lambda^2} \mathcal{B}_0 \left( \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{\lambda} \right), \quad (2.12)$$

ahol  $\mathcal{B}_0$  az imaginárius argumentumú zérus rendű Bessel-függvény. Ebből számítható a két-két vortex közötti kölcsönhatási energia

$$\mathcal{F}_{12} = \mathcal{F}_{21} = \frac{\Phi_0}{4\pi} h_{12}, \quad (2.13)$$

ami egy taszító kölcsönhatás energiája, amely  $\frac{1}{\sqrt{r}} e^{-\frac{r}{\lambda}}$  szerint csökken, ha a vortexek távolsága egymástól elég nagy, azaz ha  $r = r_1 - r_2 \gg \lambda$ , és  $\ln \frac{\lambda}{r}$  szerint divergenssé válik, ha  $r \ll \lambda$ .

A vortexek dinamikai tulajdonságainak kutatása jelenleg is aktuális probléma, és több fontos kérdést még nem lehet lezártnak tekinteni.

A termodinamikai módszerek alkalmazása [59] azt mutatta, hogy mind a mintán átvezetett áram, mind a mintában fellépő hőmérséklet gradiens képes mozgató erőként hatni a vortexekre. Ezek teljes és egzakt megismerése azonban még további vizsgálatokat igényel.

A probléma egy egyszerű megközelítése a szupravezetés kétfolyadékos modelljén alapul és a disszipációt kizárólag a normál elektronok áramának tulajdonítja. Bardeen és Stephen olyan hidrodinamikai modellből indultak ki, amelynél a  $\psi$  rendparaméter lokális értéke a lokális szuperfluid sebességtől függ, továbbá a normál



elektronok és a rács közötti egyensúlyt tételeztek fel. Ennek révén az alábbi egy-vortex mozgás-egyenletet kapják:

$$\frac{e[\mathbf{v}_s \times \mathbf{H}]}{c} - \frac{m\mathbf{v}_s}{\tau} - \frac{e[\mathbf{v}_v \times \mathbf{H}_{c2}]}{c} = 0, \quad (2.14)$$

ahol  $\mathbf{v}_s$  az egyenáram következtében fellépő szuperfluid sebesség,  $\mathbf{v}_v$  a vortex sebesség és  $\tau$  az elektron-rács relaxációs idő.

Lényeges kifogás ezen elmélettel szemben, hogy a teljes elektrokémiai potenciált a törzs határán folyamatosnak tételezi fel.

Ehelyett *Nozieres* és *Vinen* [60] az elektromos potenciál folyamatosságát tételezve fel a törzs határvonalán, az

$$\frac{e[(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_v) \times \mathbf{H}_{c2}]}{c} - \frac{m\mathbf{v}_s}{\tau} = 0 \quad (2.15)$$

vortex mozgás-egyenletet kapta. Ennek első tagja (a hidrodinamikaival analóg) Magnus erő, ami független a vortexrács kölcsönhatást jellemző második tagtól.

A kísérletek [60], [61], [62] nem döntenek egyértelműen e kérdésben.

További két olyan fontosabb vizsgálat van, amelyek a kevert állapottal szintén  $H_{c1}$  közelében, a vortexek közötti kölcsönhatás elhanyagolása mellett foglalkoztak. Ezek *Vijfeyken* és *Niessen* [63], illetve *Vinen* és *Warren* [64] nevéhez fűződnek.

Egy szuperfolyadékra ható tömegerő a  $GL$  elméletből származó  $\mathcal{T}_{ik}$  feszültség-tenzor divergenciájából adódik, és

$$\frac{\partial \mathcal{T}_{ik}}{\partial r_j} = [\mathbf{J}_s \times \text{rot } \mathbf{A}]_i \quad (2.16)$$

alakú. Ez a megfontolás azt sugallja, hogy az áramot hordozó szupravezető stacioner állapota olyan, amelyben elektrokémiai potenciál gradiens nem jön létre. Ez azonban elektrosztatikus tér létezésének a lehetőségét nem zárja ki. A kétfolyadékos modell alapján megmutatták [65], [66], hogy ilyen elektrosztatikus terek olyankor léphetnek fel, amikor az áramsűrűségben van gradiens.

*Anderson* [67] olyan közelítést használt, amelyben feltételezte, hogy a szuperfolyadékban a részecskék kvantum tér amplitúdója egy olyan átlagos értékkel rendelkezik, amelyet makroszkopikus változóként lehet kezelni. E feltevés két fontos dinamikai egyenletre vezetett. Közülük egyik a lokális áramsűrűséget leíró  $GL$  egyenlet, másik a

$$\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mu^* \quad (2.17)$$

fázis-egyenlet, ahol  $\varphi$  a részecsketér-operátor fázisa,  $\mu^*$  az elektrokémiai potenciál. (2.17) jól indokolja a szupravezetési alagút kísérleteknél [68], [69] észlelt Josephson-interferenciát [70].

$H_{c1} < H < H_{c2}$  külső mágneses tér jelenlétében a belső tér nagyságát a fluxus fonalak  $n_v$ -sűrűsége határozza meg a szupravezető mintákban [71]:

$$\mathbf{B}(\mathbf{H}) = n_v \Phi_0, \quad (2.18)$$

amely egyensúlyi állapotban homogén eloszlású. Ha a mintatestbe elektromos áramot bocsátunk, az megbontja az egyensúlyt.  $x$ -irányú  $j_Q$ -áram  $z$ -irányú  $H$  mellett



$y$ -irányú vortex gradienst hoz létre

$$\frac{4\pi}{c} j_Q = \frac{\partial B(H)}{\partial y} = \frac{\partial n_v}{\partial y} \Phi_0. \quad (2.19)$$

(Megjegyezzük, hogy a kísérletekben a transzport áram általában  $j_Q \approx 10^4$  A/cm<sup>2</sup>, viszont a vortex törzs környezetében folyó áram  $j_s \approx 10^8$  A/cm<sup>2</sup>, ami azt jelenti, hogy a külső hatás az individuális vortexek szerkezetében csak nagyon kicsi változást hoz létre.)

A vortexekre azonosan ható Lorentz-erő

$$\mathbf{F}_L = \frac{1}{c} [\mathbf{j}_Q \times \mathbf{B}] = \frac{1}{c} [\mathbf{j}_Q \times n_v \Phi_0], \quad (2.20)$$

ami a rögzítő  $F_p$ -pinning erőkkel szemben igyekszik elmozdítani a fluxus fonalakat. (Az  $F_p$  az anyagban levő inhomogenitások, rácshibák és ötvözetszemcsék, mint rögzítő centrumok jelenléte miatt lép fel.)

A pinning erő megakadályozza, hogy létrejöjjön a fluxus mozgás disszipatív folyamata. Ez azonban csak addig tart, amíg  $j_Q$  el nem éri azt a  $j_{Qc}$ -kritikus értéket, amelynél

$$\mathbf{F}_L = \mathbf{F}_p \quad (2.21)$$

(illetve, ha a vortexek közötti kölcsönhatás nem hanyagolható el, akkor

$$\mathbf{F}_L = \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_v, \quad (2.21')$$

ahol  $\mathbf{F}_v$  a kölcsönhatási erő). Ezt az állapotot az tünteti ki, hogy ilyenkor az anyag-mintában a lehetséges legnagyobb szupraáram folyhat.

Ha  $\mathbf{F}_L > (\mathbf{F}_p + \mathbf{F}_v)$ , akkor a vortexek  $v_v$ -sebességű viszkózus áramlásba kezdenek (flux-flow állapot), amelyet az

$$\mathbf{F}_L - (\mathbf{F}_p + \mathbf{F}_v) = \eta \mathbf{v}_v \quad (2.22)$$

formulában szereplő  $\eta = \eta(T, H)$  belső súrlódási tényező szab meg. E disszipatív mozgás során, mivel a  $v_v = \text{const}$  és  $j_Q = \text{const}$  állapot fenntartásához teljesítmény szükséges, a mintán  $j_Q$  irányában egy makroszkopikusan mérhető [72]

$$\epsilon = \frac{1}{c} n_v [\mathbf{v}_v \times \Phi_0] = \frac{1}{c} [\mathbf{v}_v \times \mathbf{B}] \quad (2.23)$$

nagyságú elektromos tér jelenik meg, amely arányos a vortex sebességgel. E tér-erősség fellépésének oka az, hogy flux-flow állapotban a transzport áram az anyag mágneses rácsszerkezetében kialakult normál magokon is áthalad, ami a mintatest

$$j_{Qv} = \frac{d\epsilon}{dj_Q} = \frac{1}{c^2} \frac{\Phi_0 B}{\eta} \quad (2.24)$$

véges értékű flux-flow ellenállásban nyilvánul meg.

Kim és munkatársainak empirikus formulája [73] a flux-flow ellenállás  $H$ -függését írja le

$$j_{Qv} = j_n \frac{H}{H_{c2}(0)}, \quad (2.25)$$



ahol  $\varrho_n$  a maradék ellenállás, amely egyben

$$\eta \approx \frac{1}{c^2} \frac{\Phi_0}{\varrho_n} H_{c2}(0) \quad (2.26)$$

közelítő értékét adja meg.

Ezek segítségével olyan esetben lehet meghatározni a kritikus áramot és a flux-flow ellenállást, amikor minden egyes mágneses örvény azonos pinninggel van rögzítve.

Nagy  $\kappa$ -jú anyagoknál (pl. Nb-Zr, Nb-Ta, Ti-V) a későbbi kísérletekben jól tükröződik az ismertett megfontolások eredménye.

Emellett a flux-flow ellenállásban  $H_{c2}$  közelében egy „peak”-effektust mutatnak ki [74], [75], [76].

A mikrohullámú frekvenciákon elvégzett mérések [46], [77] a felületi veszteség alapján már a kritikus áramsűrűségnél nagyságrendekkel kisebb skin áramsűrűségeknél is információt szolgáltatnak a fluxus áramlás állapotáról. Az egyenáramúakéhoz hasonló  $\varrho_v - H$  görbét adnak, azzal a különbséggel, hogy itt soha nem jelenik meg peak-effektus.

Gorkov és Kopnyin a mágneses örvények súrlódásos mozgását  $H_{c2}$  közelében vizsgálta [78]. Módszerük lényege az volt, hogy a  $GL$  egyenleteket nem-stacionárius esetre általánosították. Ennek felhasználásával Kuprijanov és Liharjov [79] a belső súrlódási együttható

$$\eta = \frac{1,47}{c^2} \frac{\Phi_0}{\varrho_n} H_{c2}(0) \quad (2.27)$$

kifejezést kapta, amely  $\eta$ -ra nézve egy minimális érték. Mágneses szennyezés jelenléte  $\eta$  nagyságát növeli.

A flux-flow állapotra jellemző feszültség-áram karakterisztikáknak a lineáris tartomány előtt megjelenő átmeneti szakaszát több dolgozat [80], [81], [82] vizsgálta. Sherril és Payne [83] az

$$U = \frac{\pi \xi^2 \varrho_0}{\Phi_0} \frac{(I - I_p)^2 B}{I - \alpha I_p} \quad (2.28)$$

formával írta le az  $U-I$  görbék nem-lineáris szakaszát. Itt  $\alpha$  egy dimenzió nélküli paraméter, amelynek értéke  $0 < \alpha < 1$ ,  $I_p$  pedig az az áramérték, amelynél először jelenik meg feszültség. Ez a formula többféle anyagon elvégzett kísérleti vizsgálatokkal összhangban van.

A vortexek valójában már a kritikus állapot elérése előtt sincsenek tökéletes egyensúlyban. A rögzítő centrumok által létesített potenciálgátak magassága a Lorentz-erő miatt az  $n_v$ -gradiens irányában lecsökken, és a fonalak termikus aktiváció révén lassú, csúszó mozgásba kezdenek. Ez az ún. „flux creep” állapot.

Véletlenszerű rászhiba eloszlást feltételezve,  $d$  méretű és  $l$  átlagos távolságú rácshibákkal számolva,

$$j_{Qc} = c \frac{H_{c1}}{4\pi l} \frac{\ln(d/\xi)}{\ln(\lambda/\xi)}, \quad (2.29)$$

ami arra a valószínűtlen lehetőségre utal, hogy a flux creep állapotból közelítve  $j_{Qc}$  majdnem független  $H$ -tól, illetve  $B$ -tól.



E nehézség kikerülése céljából, abból kiindulva, hogy az egyes vortexek szerkezete egészen  $\lambda$  távolságig terjed ki, a  $\lambda$ -n belüli vortexek egymással kölcsönhatnak, és bizonyos mértékig együttesen kezelhetők, *Anderson* [84] bevezette a fluxus-köteg fogalmát. Ennek segítségével

$$j_{Qc} = \varepsilon \frac{c}{8\pi l} \frac{H_c^2}{B} \frac{d^2}{\lambda} \quad (2.30)$$

lesz, ahol  $\varepsilon$  határozatlan konstans.

A flux creep jelenség létezését kísérletileg is igazolták [85].

Az első szupravezető szolenoidok építésekor észrevették, hogy a tekercsek kritikus árama adott mágneses térben jóval kisebb, mint az ugyanazon drótból készített rövid mintáké. Ez a degradációs jelenség erősebb a zártabb terű szupravezető eszközöknél. Az idevágó megfigyelések eléggé divergensek, de azt megmutatják, hogy a hatás alapvetően a hirtelen, lavinaszerűen bekövetkező fluxus behatolással, a „flux jump” instabilitással [86], [87] van kapcsolatban.

Az áramot hordozó drótnak egy-egy kis részét a fluxus ugrás ideiglenesen normál állapotba viheti át. Az ennek következtében fellépő Joule-hő a normál szakasz további növekedését eredményezheti, egészen addig, amíg az egész tekercs normállá nem válik.

Ez a hőterjedési folyamat tehát végső soron a szupravezető állapot teljes lerontásához vezethet.

Az ilyenkor fellépő disszipáció mértékét a vizsgálati minta adatai, a mágneses tér időbeli változása és az átfolyó áram [88] határozzák meg.



### III. rész

## PARA- ÉS DIAMÁGNESES SZENNYEZÉSEK EGYÜTTES HATÁSA A SZUPRAVEZETÉSI ÁTMENETRE

### 1. Bevezetés

E témára vonatkozó vizsgálatunk komplexnek tekinthető, mivel egyaránt leírja a paramágneses és a diamágneses szennyezők hatását, másrészt mind az elektron szórási mechanizmusban, mind a Fermi-felület topológiájában létrejövő változást képes figyelembe venni.

A para- és diamágneses szennyezők együttes hatása vagy növekvő, vagy csökkenő jellegű változást idézhet elő  $T_c$ -ben, illetve a paramágneses atomok csökkentő hatása teljesen kompenzálható diamágneses atomok hozzáadása által.

A Lifsic-féle elektron átmenet lényege abban fogalmazható meg, hogy ha az az  $\varepsilon_c$  energiaérték, amelynél a Fermi-felület topológia változása végbemegy, közel van az  $\varepsilon_F$  — Fermi-energiához, akkor  $\varepsilon_F$  kis változása esetén létrejöhet a topológia változás és  $v(\varepsilon)$ -normál elektron állapot sűrűségnek szingularitása van az  $\varepsilon_F \approx \varepsilon_c$  Fermi-felületnél. Ilyenkor  $v(\varepsilon)$  előállítható egy  $v_0(\varepsilon)$  függvény és egy nem-monoton additív tag összegeként:

$$v(\varepsilon) = v_0(\varepsilon) + \delta v(\varepsilon). \quad (3.1)$$

Az elektron átmenet jellegétől függően (zárt  $\leftrightarrow$  nyílt Fermi-felület átalakulás, elektron csoportok keletkezése, vagy eltűnése),  $T_c$  az előbb említett módokon viselkedhet.

### 2. A szupravezető Green-függvény egyenletei

Célunk az, hogy egy szupravezető számára levezessük azokat a Green-függvény-egyenleteket, amelyek képesek számításba venni a para- és diamágneses szennyezések kollektív hatását a szupravezetési átmeneti hőmérsékletre.

Abból indulunk ki, hogy a teljes Hamilton-operátor a

$$\hat{H} = \hat{H}^e + \hat{H}^d + \hat{H}^p \quad (3.2)$$

alakban írható fel, ahol  $\hat{H}^e$  az elektron-elektron kölcsönhatás effektív hamiltonianja, az elektronoknak a diamágneses és a paramágneses atomokkal való kölcsönhatását pedig  $\hat{H}^d$ , illetve  $\hat{H}^p$  jellemzi. A  $\hat{H}^e$  operátort a

$$\hat{H}^e = - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int \lambda_{\alpha}^* c_{\alpha}^+(\mathbf{r}) c_{\beta}^+(\mathbf{r}) c_{\beta}(\mathbf{r}) c_{\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.3)$$

kifejezéssel jellemzzük, ahol  $\lambda^*$  az elektron-elektron kölcsönhatási effektív potenciál,  $c_\alpha^+(\mathbf{r})$  és  $c_\beta(\mathbf{r})$  az elektronok második kvantálású keltő és eltüntető operátora. Az elektronok és a diamágneses, illetve paramágneses szennyezések közötti kölcsönhatást jellemző hamiltonian pedig

$$\hat{H}^{\text{szenny}} = \sum_{\alpha, \beta} \int c_\alpha^+(\mathbf{r}) \mathcal{V}_{\alpha, \beta}(\mathbf{r}) c_\beta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \hat{H}^d + \hat{H}^p, \quad (3.4)$$

ahol

$$\mathcal{V}(\mathbf{r}) = \sum_j u^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^d) + \sum_k u^p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k^p)$$

és  $u^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^d)$  egy elektron és a  $j$ -edik diamágneses atom kölcsönhatási potenciálja,  $u^p(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k^p)$  ugyanaz a  $k$ -adik paramágneses atomra nézve, tehát a  $j$ -re és  $k$ -ra vonatkozó szummázás az összes szennyező atomot érinti.

Mivel egy elektron és egy paramágneses szennyező atom közötti kölcsönhatás a kicserélődési tagot is tartalmazza

$$u^p(\mathbf{r}) = u_1^p(\mathbf{r}) + u_2^p(\mathbf{r}) (\mathbf{s} \boldsymbol{\sigma}_P), \quad (3.5)$$

ahol  $\mathbf{s} = (\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3)$  a szennyező atom momentuma,  $\boldsymbol{\sigma}_P = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$  az elektron Pauli-féle spin mátrixa.

A számítás során célszerű [44] az alábbi négykomponensű keltő, — illetve eltüntető operátort használni

$$c^+(\mathbf{r}) = \{c_+^+(\mathbf{r}), c_-^+(\mathbf{r}), c_+(\mathbf{r}), c_-(\mathbf{r})\}; \quad c(\mathbf{r}) = \begin{Bmatrix} c_+(\mathbf{r}) \\ c_-^+(\mathbf{r}) \\ c_+(\mathbf{r}) \\ c_-^+(\mathbf{r}) \end{Bmatrix}, \quad (3.6)$$

mert lehetővé teszi, hogy bevezessük a  $g_{\alpha, \beta}(1, 1')$   $4 \times 4$ -es matrix Green-függvényt a négy egy-elektron  $\hat{G}$ ,  $\hat{F}$ ,  $\hat{F}^+$  és  $\hat{G}^{tr}$  Green-függvény helyett:

$$g_{\alpha, \beta}(1, 1') = \begin{pmatrix} \hat{G}(1, 1') & \hat{F}(1, 1') \\ \hat{F}^+(1, 1') & \hat{G}^{tr}(1, 1') \end{pmatrix} = \frac{1}{i} \langle \hat{T} c_\alpha(1) c_\beta(1') \rangle, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4. \quad (3.7)$$

A  $\langle \dots \rangle$  a statisztikai átlagot és a paramágneses atomok spin irányaira, illetve a dia- és paramágneses szennyezők helyzetére vett átlagot együttesen jellemzi, ahol  $\hat{T}$  a Wick-féle kronologikus operátor.

Pontszerű kölcsönhatást tételezve fel az elektronok és a szennyező atomok között

$$\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}) = \sum_j u^d \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^d) + \sum_k u_1^p \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k^p) + \sum_k u_2^p \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k^p) (\mathbf{s}_j \boldsymbol{\sigma}_P), \quad (3.8)$$



ami a

$$\sigma (= \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3) = \begin{pmatrix} \sigma_P & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \sigma_P \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\hat{\tau}_1 = \begin{pmatrix} \hat{O} & \hat{I} \\ \hat{I} & \hat{O} \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} \hat{I} & \hat{O} \\ \hat{O} & -\hat{I} \end{pmatrix}, \quad \hat{U} = \begin{pmatrix} \hat{I} & \hat{O} \\ \hat{O} & \hat{I} \end{pmatrix}$$

4×4-es mátrixok bevezetésével

$$\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}) = \sum_j c^+(\mathbf{r}_j^d) u^d \hat{\tau}_3 c(\mathbf{r}_j^d) + \sum_k c^+(\mathbf{r}_k^p) [u_1^p \hat{\tau}_3 + u_2^p \alpha s_j] c(\mathbf{r}_k^p) \quad (3.10)$$

alakban írható, ahol

$$\alpha = \frac{\hat{U} + \hat{\tau}_3}{2} \sigma + \frac{\hat{U} - \tau_3}{2} \hat{\sigma}_2 \sigma \hat{\sigma}_2 \quad (3.11)$$

és  $\mathbf{O} = (\hat{O}, \hat{O}, \hat{O})$  továbbá  $\hat{O}$  a  $2 \times 2$ -es zérus matrix,  $\hat{I}$  a  $2 \times 2$ -es egység mátrix.

Röviden vázolja a mátrix Green-függvény levezetésének módját, arra utalunk, hogy az első argumentum szerinti differenciálása és a mozgásegyenlet alkalmazása a Heisenberg-operátorra, a Wick-teoremmel együtt a

$$g^{-1}(1,1') = \left[ i \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\tau}_3 \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right] \delta(1,1') - \hat{\Delta}(1) \delta(1-1') - \Omega_1(1,1') - \Omega_2(1,1') \quad (3.12)$$

eredményre, vezet, ahol  $\mu$  a kémiai potenciál. (3.12) első tagja a szabad részecske propagációját írja le, a második tag

$$\hat{\Delta}(1) = -i\lambda^* \hat{\tau}_3 \hat{g}(1,1') \hat{\tau}_3 \quad (3.13)$$

a szupravezetésért felelős kölcsönhatást jellemzi, a harmadik és negyedik tag

$$\Omega_1(1,1') = \frac{\pi}{mp_F} \Gamma_n \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1') \hat{\tau}_3 \hat{g}(1,1') \hat{\tau}_3 \quad (3.14)$$

$$\Omega_2(1,1') = \frac{\pi}{3mp_F} \Gamma_s \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1') \alpha \hat{g}(1,1') \alpha$$

pedig a spin-független és a spin-függő szórási folyamatokat szemlélteti. A formulákban szereplő  $\Gamma_n$ , illetve  $\Gamma_s$  a normál- és a spin-flip ütközések száma a Fermi-felület közelében:

$$\Gamma_n = \frac{1}{\pi} mp_F \{ n^d |u^d|^2 + n^p |u_1^p|^2 \} = \Gamma_n^d + \Gamma_n^p \quad (3.15)$$

$$\Gamma_s = \frac{1}{\pi} mp_F n^p \langle s_j(s_j + 1) \rangle |u_2^p|^2,$$

ahol  $p_F$  a Fermi-impulzus,  $m$  az elektron tömege  $n^d$  és  $n^p$  a dia, — illetve a paramágneses szennyezési koncentráció, továbbá  $\langle s_j(s_j + 1) \rangle$  az  $s_j^2$ -en vett átlag.

Minthogy a véletlenszerűen elhelyezkedő szennyező atomokra átlagolt Green-függvény csak a koordináták különbségétől függ, kényelmes a Fourier-transzformált használata:

$$g(1,1') = iT \sum_v \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \hat{g}_v(\mathbf{p}) e^{ip(r_1-r_1')-i\zeta_v(t_1-t_1')}, \quad (3.16)$$

ahol  $T$  az abszolút hőmérséklet,  $\zeta_v = i\pi\nu T$  és az összegezés az összes páratlan  $\nu$ -számokra kiterjed. Ily módon a (3.12) egyenletet a

$$g_v^{-1}(\mathbf{p}) = \zeta_v \hat{U} - \varepsilon_p \hat{\tau}_3 - \hat{\Delta} - \frac{\pi}{mp_F} \Gamma_n \tau_3 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} g_v(\mathbf{p}) \hat{\tau}_3 - \frac{1}{3} \frac{\pi}{mp_F} \Gamma_s \alpha \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} g_v(\mathbf{p}) \hat{\tau}_3 \alpha \quad (3.17)$$

alakra tudjuk transzformálni, ahol

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} - \mu.$$

A (3.17) egyenlet megoldása céljából  $g_v^{-1}(p)$ -t úgy tekinthetjük, mint egy olyan összeget, amelynek minden tagja jól definiált mátrix struktúrával rendelkezik. Amint látható, (3.17)-ben szerepel egy tag, amely az  $\hat{U}$ -egység mátrix-szal arányos és egy másik, amely a  $\hat{\tau}_3$ -mátrix-szal arányos, a maradék tagokat viszont a  $\hat{\Delta}$  mátrix szerkezete jellemzi. (3.7), (3.9) és (3.13) felhasználásával azt kapjuk, hogy

$$\hat{\Delta} = \Delta \hat{\tau}_1 \hat{\sigma}_2, \quad (3.18)$$

ahol  $\Delta$  egy reális mennyiség, ily módon tehát a  $\hat{g}_v^{-1}(\mathbf{p})$  kifejezésében olyan tagok is szerepelnek, amelyek a  $\hat{\tau}_1 \hat{\sigma}_2$  mátrix-szal arányosak. Emiatt a  $\hat{g}_v^{-1}(\mathbf{p})$  függvényt a

$$g_v^{-1}(\mathbf{p}) = \tilde{\omega}(\zeta_v) \hat{U} - \tilde{\varepsilon}_p(\zeta_v) \hat{\tau}_3 + \tilde{\Delta}(\zeta_v) \hat{\tau}_1 \hat{\sigma}_2 \quad (3.19)$$

alakban lehet felírni, ahol  $\tilde{\omega}(\zeta_v)$ ,  $\tilde{\varepsilon}_p(\zeta_v)$  és  $\tilde{\Delta}(\zeta_v)$  ismeretlen függvények, amelyeket meg kell határoznunk. (3.19)-et beírva (3.18)-ba és az azonos mátrixok előtti faktorokat egymással egyenlővé téve, az ismeretlen függvényekre vonatkozó egyenletek rendszeréhez jutunk:

$$\tilde{\omega}(\zeta_v) = \zeta_v - [n^d u^{d^2} + n^p u_1^{p^2} + n^p u_2^{p^2} \langle s(s+1) \rangle] \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - \tilde{\Delta}^2} \quad (3.20)$$

$$\tilde{\varepsilon}_p(\zeta_v) = \varepsilon_p + [n^d u^{d^2} + n^p u_1^{p^2} + n^p u_2^{p^2} \langle s(s+1) \rangle] \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\varepsilon}_p}{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - \tilde{\Delta}^2} \quad (3.21)$$

$$\tilde{\Delta}(\zeta_v) = \Delta - [n^d u^{d^2} + n^p u_1^{p^2} + n^p u_2^{p^2} \langle s(s+1) \rangle] \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - \tilde{\Delta}^2}. \quad (3.22)$$

A szupravezetői energia hézagra vonatkozó egyenlet pontos kifejezése a (3.13) és a (3.18) segítségével adódik:

$$\Delta = -\lambda^* T \sum_v \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\Delta}(\zeta_v)}{\tilde{\omega}^2(\zeta_v) - \tilde{\varepsilon}_p^2(\zeta_v) - \tilde{\Delta}^2(\zeta_v)}, \quad (3.23)$$



amelybe (3.22)-ből a  $\tilde{A} = \tilde{A}(\zeta_v)$ -t behelyettesítve, a

$$\begin{aligned}
 & -\lambda T \sum_v \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - \tilde{A}^2]^{-1} \times \\
 & \times \left\{ 1 + [n^d u^{d^2} + n^p u_1^{p^2} - n^p u_2^{p^2} \langle s(s+1) \rangle] \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - \tilde{A}^2]^{-1} \right\}^{-1} = 1
 \end{aligned} \quad (3.24)$$

összefüggést nyerjük.

Mivel ez a kifejezés a paramágneses és diamágneses szennyezők hatását, továbbá a szórási mechanizmus és Fermi-felület topológia változását egyaránt tartalmazza, a szennyezett állapothoz tartozó kritikus hőmérséklet kiszámítására kellő alapot biztosít.

### 3. A szennyezési kritikus hőmérséklet meghatározása

Mivel a  $T_c$  kiszámítására törekszünk, abból kell kiindulni, hogy a (3.24)-ben szereplő energiahézag e hőmérsékletnél eltűnik, tehát

$$\begin{aligned}
 & -\lambda^* T_c \sum_v \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2]^{-1} \times \\
 & \times \left\{ 1 + [n^d u^{d^2} + n^p u_1^{p^2} - n^p u_2^{p^2} \langle s(s+1) \rangle] \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2]^{-1} \right\}^{-1} = 1.
 \end{aligned} \quad (3.25)$$

(3.20), (3.21) és (3.22)-ben figyelembe véve az elektron energiától való függést, célszerű, az impulzus szerinti integrálásról a

$$\frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} = v(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.26)$$

relációnak megfelelő energia szerinti integrálásra áttérni, ahol a normál egy-elektron állapotsűrűség [89]

$$v(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{v_F} df. \quad (3.27)$$

Itt  $v_F$  az elektron sebessége az  $\varepsilon(p) = \text{konst}$  izoenergetikus felületen és  $df$  e felület eleme.  $v(\varepsilon)$ -ra pedig fennáll a Lifsic-singularitás és explicite (3.1) alakban állítható elő.

Mivel (3.20)–(3.22)-ben a szennyezés koncentráció az integráljel előtt áll, elegendő csak a  $v_0(\varepsilon)$ -nak  $\varepsilon = \varepsilon_F$ -nél való alkalmazása, és ily módon  $\tilde{\varepsilon}_p(\zeta_v) = \varepsilon_p$ , valamint  $T_c$ -nél  $\tilde{A} = A = 0$  alapján azt kapjuk, hogy

$$\tilde{\omega}(\zeta_v) = \zeta_v + i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} \text{sign Im } \zeta_v \quad (3.28)$$

és ezzel (3.25) kiintegrálása a

$$\begin{aligned} [n^d u^{d^2} + n^p u_1^{p^2} - n^p u_2^{p^2} \langle s(s+1) \rangle] \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [\tilde{\omega}^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2]^{-1} = \\ = - \frac{\Gamma_n - \Gamma_s}{2} \frac{\text{sign Im } \zeta_v}{v\pi T_c + \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} \text{sign Im } \zeta_v} \end{aligned} \quad (3.29)$$

eredményre vezet. Ezt visszairva (3.25)-be és az összegezést csak a pozitív páratlan  $v$  számokra vonatkoztatva [90], végül is a kis szennyezés koncentrációkat leíró, első közelítésű  $T_c$ -formulára jutunk

$$-\lambda^* \text{Im} \int \frac{d\omega}{\pi} \int d\varepsilon \, th \frac{\omega}{2T_c} v(\varepsilon + \varepsilon_F) \frac{\omega + i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2}}{(\omega + i\Gamma_s) \left[ \left( \omega + i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} \right)^2 - \varepsilon^2 \right]} = 1, \quad (3.30)$$

ahol  $v(\varepsilon + \varepsilon_F)$  a normál egy-elektron állapotsűrűség és  $\varepsilon$  a Fermi-felülettől számítható.

$T_c$  pontos kifejezésének előállítása további finomítások elvégzését igényli. Az elektron állapotsűrűség nem-monoton része Lifsic szerint

$$\delta v(\varepsilon) = \begin{cases} \mp \frac{m_1}{2\pi^2} [2m_3(\varepsilon_c - \varepsilon)]^{\frac{1}{2}} \vartheta(\varepsilon_c - \varepsilon) \\ \mp \frac{m_1}{2\pi^2} [2m_3(\varepsilon - \varepsilon_c)]^{\frac{1}{2}} \vartheta(\varepsilon - \varepsilon_c) \end{cases} \quad (3.31)$$

alakú, ahol  $m_1$  és  $m_3$  az  $M$  tömegtenzor átlós elemei:

$$M = \frac{m_1 \sqrt{2m_3}}{2\pi^2}, \quad (3.32)$$

továbbá

$$\vartheta = \vartheta(\varepsilon - \varepsilon_c) = \begin{cases} 1, & \varepsilon - \varepsilon_c > 0 \\ 0, & \varepsilon - \varepsilon_c < 0. \end{cases} \quad (3.33)$$

(3.31)-ben a felső sor zárt Fermi-felületből nyíltba való átmenetet, illetve elektron csoport eltűnést, az alsó viszont nyílt  $\rightarrow$  zárt felület átmenetet, illetve elektron csoport keletkezést jelent és pedig oly módon, hogy a  $+$  előjel az elektron generációt vagy megszűnést, a  $-$  előjel pedig a Fermi-felület átalakulást szemlélteti.

Az  $\varepsilon_F$ -nek a szennyezéstől való függésére feltételezve az

$$\varepsilon_F = \varepsilon_F^0 + \gamma^d \Delta Z^d \Gamma_n^d + \gamma^p \Delta Z^p \Gamma_n^p$$

relációt, ahol  $\varepsilon_F^0$  a tiszta anyag Fermi-energiája,  $\Delta Z^d$  és  $\Delta Z^p$  a fématom és a szennyezők közötti valencia különbség,  $\gamma^d$  és  $\gamma^p$  egységnyi nagyságrendű numerikus konstansok, és elektron csoport keletkezését figyelembe véve

$$\delta v(\varepsilon) = M \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \vartheta(\varepsilon - \varepsilon_c), \quad (3.34)$$



el kell végezni a (3.30) formulában szereplő,  $\varepsilon$ -szerinti integrálást, hogy  $T_c$  értékét kiszámíthassuk.

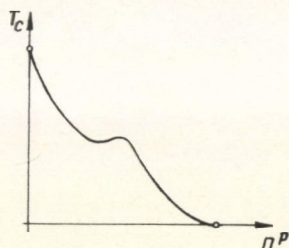
Mindezek alapján,  $T_c$ -re végül is a következő általános kifejezést kapjuk [91]:

$$\lambda^* v_0(\varepsilon_F^0) \operatorname{Re} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{th \frac{\omega}{2T_c}}{\omega + i\Gamma_s} - \lambda^* M \operatorname{Re} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{th \frac{\omega}{2T_c}}{\omega + i\Gamma_s} (\sqrt{\alpha - \omega} - \sqrt{\alpha^* + \omega}) = 1, \quad (3.35)$$

ahol

$$\alpha = \gamma^d \Delta Z^d \Gamma_n^d + \gamma^p \Delta Z^p \Gamma_n^p \rightarrow i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} + \varepsilon_F^0 - \varepsilon_c$$

$$\alpha^* = \gamma^d \Delta Z^d \Gamma_n^d + \gamma^p \Delta Z^p \Gamma_n^p + i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} \varepsilon_F^0 - \varepsilon_c.$$



3.1 ábra

Ez az általunk kapott egyenlet teljesíti a tárgyalás elején kitűzött célt. A kifejezés első része visszaadja a csak a paramágneses hatásra, a Fermi-felület topológia változásának figyelembevétel nélkül kapott Abrikoszov–Gorkov-féle eredményt (3.1 ábra). A második rész leírja az elektronátmenet hatását olyankor, amikor diamágneses szennyezők is vannak jelen.

Egyezésben a kísérleti feltételekkel, azt az esetet konkrétizáljuk, amikor rögzített paramágneses szennyezés koncentráció mellett

$$\frac{|\alpha|}{2T_c} \leq 1 \quad \text{és} \quad \frac{\Gamma_s}{2T_c} \leq 0,1. \quad (3.36)$$

Ekkor a (3.35) második tagjának sorfejtése révén azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} & \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{th 2T_c}{\omega + i\Gamma_s} (\sqrt{\alpha - \omega} - \sqrt{\alpha^* + \omega}) = \\ &= \sqrt{2T_c} \int_0^{\omega_D/2T_c} d\omega \frac{th\omega}{\omega + i\Gamma_s/2T_c} \left[ i\omega^{1/2} - \frac{i\alpha}{4T_c \omega^{1/2}} - \omega^{1/2} - \frac{\alpha^*}{4T_c \omega^{1/2}} + \dots \right] + \\ &+ \int_0^{\alpha/2T_c} d\omega \frac{th\omega}{\omega + i\Gamma_s/2T_c} \left[ \left( \frac{\alpha}{2T_c} \right)^{1/2} - \frac{\omega}{2(\alpha/2T_c)^{1/2}} - \left( \frac{\alpha^*}{2T_c} \right)^{1/2} - \frac{\omega}{2(\alpha^*/2T_c)^{1/2}} + \dots \right] - \\ &- \int_0^{\alpha/2T_c} d\omega \frac{th\omega}{\omega + i\Gamma_s/2T_c} \left[ i\omega^{1/2} - \frac{i\alpha}{4T_c \omega^{1/2}} - \omega^{1/2} - \frac{\alpha^*}{4T_c \omega^{1/2}} \right], \end{aligned} \quad (3.37)$$

amelyből a (3.36) feltételnek megfelelően csak az elsőrendű tagokat tekintve,  $T_c$  egy explicit kifejezése adódik

$$\begin{aligned} \frac{\Delta T_c}{T_c} = & A(\Gamma_s) - \frac{M}{v_0(\varepsilon_F^0)} \left\{ \frac{\operatorname{Re} \alpha^{1/2} |\alpha|^{1/2}}{T_c} - \frac{\operatorname{Im} \alpha^{1/2} \Gamma_s}{2T_c} + 2\sqrt{\Gamma_s} + \frac{|\alpha|^{3/2}}{3T_c} + \right. \\ & + \frac{\operatorname{Im} \alpha - \operatorname{Re} \alpha}{2\sqrt{2T_c}} \left[ C - 2 \left( \frac{|\alpha|}{2T_c} \right)^{1/2} + \frac{3}{\sqrt{2}} \operatorname{arctg} \left( \left( \frac{2|\alpha|}{\Gamma_s} \right)^{1/2} - 1 \right) + \frac{3}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{4} \right] - \\ & \left. - 2\sqrt{\Gamma_s} \left[ \frac{1}{2\sqrt{2}} \operatorname{arctg} \left( \left( \frac{2|\alpha|}{\Gamma_s} \right)^{1/2} - 1 \right) - \frac{1}{4\sqrt{2}} \ln \frac{|\alpha| + \sqrt{2|\alpha|\Gamma_s} + \Gamma_s}{|\alpha| - \sqrt{2|\alpha|\Gamma_s} - \Gamma_s} + \frac{\pi}{8\sqrt{2}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

ahol  $T_c^0$  a tiszta anyag kritikus hőmérséklete,  $A(\Gamma_s)$  a (3.35) első tagjának megfelelően, az Abrikoszov—Gorkov-elmélet következményeként lép fel, és  $2 < C = \text{konst} < 2,5$ .

A következő logikus lépés annak meghatározása, hogy  $T_c$  hogyan függ a  $P$  nyomástól zérus paramágneses szennyezés koncentráció esetén.  $T_c$ -nek  $P$ -szerinti deriválása a

$$\begin{aligned} \frac{dT_c}{dP} (\Gamma_n^d) = & \frac{M}{v_0(\varepsilon_F^0)} \frac{d\varepsilon_F^0}{dP} \left[ \frac{CT_c^{1/2}}{2\sqrt{2}} - \frac{|\alpha|^{1/2}}{2} - \frac{|\operatorname{Re} \alpha| + |\alpha|}{2\operatorname{Re} \alpha^{1/2}} - \right. \\ & \left. - \frac{|\operatorname{Re} \alpha|}{\alpha} \left( \operatorname{Re} \alpha^{1/2} - \frac{|\alpha|}{2} + \frac{\operatorname{Re} \alpha - \operatorname{Im} \alpha}{4\alpha^{1/2}} \right) \right] + C'(\omega_D, v_0(\varepsilon_F^0)) \end{aligned} \quad (3.39)$$

relációra vezet, amely a nyomástól való meglehetősen erős függést reprezentálja.

Kapott eredményeink a kísérleti vizsgálatokkal [27], [29], [92] jó egyezésben vannak.

#### 4. Szennyezések miatti szupravezetés $T_c = 0$ K közelében

Felismertük [93], hogy a mágneses szennyezések miatt előállhatnak olyan esetek, amikor  $T_c$  az abszolút zérusfokhoz tart. Ez a paramágneses szennyezőknek köszönhető.

(3.35) eredményünket erre alkalmazva látszik, hogy ilyenkor

$$\operatorname{th} \frac{\omega}{2T_c} = 1, \quad (3.40)$$

és ha  $\Gamma_s = \Gamma_{s0}$ , ahol  $\Gamma_{s0}$  az az érték, amelynél az Abrikoszov—Gorkov-elmélet szerint  $T_c = 0$  K, akkor

$$\lambda^* v_0(\varepsilon_F^0) \operatorname{Re} \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\omega + i\Gamma_s} = 1. \quad (3.41)$$

Felírva, hogy  $\Gamma_s = \Gamma_{s0} + \Delta\Gamma_{s0}$ , és iterációs módszerrel számítva, első közelítésben azt kapjuk, hogy

$$\Delta\Gamma_{s0} = C \operatorname{Re} \left\{ - \int_0^{\omega_D} \frac{i(\Gamma_n + \Gamma_s) + 2\omega}{(\omega + i\Gamma_{s0})(\sqrt{\alpha_0 - \omega} + \sqrt{\alpha_0^* + \omega})} d\omega \right\}, \quad (3.42)$$



ahol

$$C = -\frac{M}{v_0(\epsilon_F^0)} \frac{\Gamma_{s0}(\omega_D^2 + \Gamma_{s0}^2)}{\omega_D^2}.$$

Tekintve, hogy  $\Gamma_{s0}/\omega_D \sim 1$ , a (3.42) nevezőjében szereplő négyzetgyökös tényezők abszolút értéke nagy, közelítőleg írható, hogy

$$\Delta\Gamma_{s0} = C \operatorname{Re} \left\{ \frac{-i(\Gamma_{n0} + \Gamma_{s0}) \ln(\omega + i\Gamma_{s0} - 2\omega + 2i\Gamma_{s0} \ln(\omega + i\Gamma_{s0}))}{\sqrt{\alpha_0 - \omega} + \sqrt{\alpha_0^* + \omega}} \right\} \Big|_0^{\omega_D}. \quad (3.43)$$

A  $\Delta\Gamma_{s0}$  mennyiség értékét két, kísérletileg is fontos határesetben vizsgáljuk meg.

a) Ha a *szórási folyamatok* dominálnak, azaz  $\gamma^p < 1$ , továbbá feltételezve, hogy  $\Gamma_n^d = 0$ , akkor (3.43) kifejezés a következő alakra hozható:

$$\Delta\Gamma_{s0} = C \operatorname{Re} \left\{ \frac{i(\Gamma_{s0} - \Gamma_n) \ln(\omega_D + i\Gamma_{s0}) - 2\omega_D}{(i+1)\sqrt{\omega_D + \frac{1}{2}i(\Gamma_n + \Gamma_{s0})}} - \frac{i(\Gamma_{s0} - \Gamma_n) \ln i\Gamma_{s0}}{\sqrt{2}i\sqrt{\frac{1}{2}(\Gamma_n + \Gamma_{s0})}} \right\}. \quad (3.44)$$

Innét a valós részt kiválasztva, megfelelő számítás után

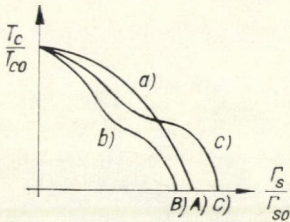
$$\begin{aligned} \Delta\Gamma_{s0} = & C \frac{\{(\Gamma_{s0} - \Gamma_{n0}^p)[\ln(\omega_D^2 + \Gamma_{s0}^2) - 2 \operatorname{arctg}(\Gamma_{s0}/\omega_D)] - 4\omega_D\} \cos \beta}{4 \left[ \omega_D^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{s0} + \Gamma_{n0}^p)^2 \right]^{1/4}} + \\ & + C \frac{\{(\Gamma_{s0} - \Gamma_{n0}^p)[\ln(\omega_D^2 + \Gamma_{s0}^2) + 2 \operatorname{arctg}(\Gamma_{s0}/\omega_D)] + 4\omega_D\} \sin \beta}{4 \left[ \omega_D^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{s0} + \Gamma_{n0}^p)^2 \right]^{1/4}} + \\ & + C \frac{\Gamma_{s0} - \Gamma_{n0}^p}{(\Gamma_{s0} + \Gamma_{n0}^p)^{1/2}} \ln \Gamma_{s0}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

ahol

$$\beta = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{\Gamma_{s0} + \Gamma_{n0}^p}{2\omega_D}.$$

A kapott összefüggés szerint, ha  $M > 0$  (és megfelelően  $C < 0$ ), akkor  $\Delta\Gamma_{s0} > 0$ , viszont ha  $M < 0$  (és megfelelően  $C > 0$ ), ilyenkor  $\Delta\Gamma_{s0} < 0$ . Az első esetben arra a következtetésre juthatunk, hogy elektron csoport jelenik meg a Brillouin-zónában függetlenül attól, hogy egyéb mechanizmusok is közrejátszhatnak a kritikus hőmérséklet-csökkenésben. Ha viszont  $\Delta\Gamma_{s0} < 0$ , akkor egyértelmű következtetést nem vonhatunk le.

A 3.2 ábrán feltüntetett *a)* görbe az Abrikoszov—Gorkov-féle eredményt szemlélteti, *b)* kísérleti görbét [94] pedig összehasonlítva az általunk kapott eredménnyel, a kettő között jó egyezést tapasztalunk. A *c)* görbe pozi-



3.2 ábra

tív effektív tömegű ötvözetet reprezentál. A megjelölt  $A)$  pont a  $\Gamma_s = \Gamma_{s0}$  egyezésnek felel meg,  $B)$  pont az  $M < 0$  esetet, a  $C)$  pont pedig az  $M > 0$  esetet fejezi ki.

Az eredmények szemléltetésére numerikus becslést is végezhetünk. Adatainkat In-ra vonatkoztatva

$$T_{c0} = 3,4 \text{ K}, \quad \omega_D = 109 \text{ K}, \quad \Gamma_{s0} = \frac{\pi}{2} \frac{T_c^0}{\gamma}, \quad \gamma = 3,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{cal}}{\text{grad}^2 \text{ mol}},$$

$$v^0(\varepsilon_F^0) = 9,2 \cdot 10^{33} \text{ erg}^{-1} \text{ cm}^{-3}, \quad m^* = 1,4 m,$$

$$M = \frac{m^{*3/2}}{1,41 \cdot \pi^2} = \frac{27 \cdot 10^{-42}}{14} = 2 \cdot 10^{-42} \text{ gr}^{3/2},$$

ahol  $m^*$  effektív elektron tömeget izotropnak fogtuk fel és feltételeztük, hogy  $\Gamma_{n0}^p \sim 10^2 \Gamma_{s0}$ . Egybevetve a  $T_c$ -re vonatkozó BCS-féle

$$T_c^0 = 1,2 \omega_D \cdot e^{-\frac{1}{\lambda v_0(\varepsilon_F^0)}}$$

formulát a  $\Gamma_{s0}$ -ra vonatkozó Abrikoszov—Gorkov kifejezéssel

$$\lambda^* v_0(\varepsilon_F^0) \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega}{\omega^2 + \Gamma_{s0}^2} = 1,$$

és ily módon

$$\Gamma_{s0} \approx \omega_D \cdot e^{-\frac{1}{\lambda v_0(\varepsilon_F^0)}}$$

miatt látszik, hogy  $\Gamma_{s0} \sim 1,2 T_c^0$ , továbbá ezekből az adatokból  $\Delta \Gamma_{s0} / \Gamma_{s0} = 0,1 \div 0,3$  értéket kapunk.

b) Ha a *Fermi-felület topológiájának* megváltozása dominál, azaz  $\gamma^p > 1$ , továbbá feltételezve, hogy  $\Gamma_n^d \approx 0$  és  $\Delta Z^p > 0$ , akkor a (3.43) kifejezés a képzetes rész elhanyagolásával a következő alakot ölti:

$$\Delta \Gamma_{s0} = \frac{M}{v_0(\varepsilon_F^0)} \frac{\Gamma_{s0}(\omega_D^2 + \Gamma_{s0}^2)}{\omega_D^2} \left[ \frac{(\Gamma_{s0} - \Gamma_{n0}^p) \arctg \frac{\Gamma_{s0}}{\omega_D} + 2\omega_D}{\sqrt{\alpha_0 - \omega_D} + \sqrt{\alpha_0 + \omega_D}} - \frac{\pi \Gamma_{s0} - \Gamma_{n0}^p}{4 \sqrt{\alpha_0}} \right], \quad (3.46)$$

ahol  $\alpha_0 = \gamma^p \Delta Z^p \Gamma_{n0}^p > \omega_D$  és  $\varepsilon_F^0 = \varepsilon_c$ .

Olyankor viszont, amikor  $\Delta Z^p < 0$ , hasonló számítások eredményeként

$$\Delta \Gamma_{s0} = \frac{M}{v_0(\varepsilon_F^0)} \frac{\Gamma_{s0}(\omega_D^2 + \Gamma_{s0}^2)}{2\omega_D^2} \frac{(\Gamma_{s0} - \Gamma_{n0}^p)}{2\omega_D^2} \left[ \frac{\ln \Gamma_{s0}}{\sqrt{|\alpha_0|}} - \frac{\ln(\omega_D^2 + \Gamma_{s0}^2)}{\sqrt{|\alpha_0| + \omega_D} + \sqrt{|\alpha_0| - \omega_D}} \right] \quad (3.47)$$

összefüggés adódik.

Kísérleti szempontokat figyelembe véve megjegyezzük, hogy a topológia változás miatt fellépő hőmérséklet-változás önmagában is kimérhető. Ugyanis tiszta szupravezető anyaghoz  $+\Delta Z^d$ -jú, illetve  $-\Delta Z^d$ -jú diamágnese szennyezést keverve, a  $\lambda^*$  elektron-elektron kölcsönhatási potenciál izotropizálható, és ezáltal a Kadanoff—Markowitz-féle mechanizmus [32] a további szennyezés koncentráció növelésnél nem játszik szerepet.



#### IV. rész

### A SZTATIKAI ÉS DINAMIKAI VORTEX ÁLLAPOT KÍSÉRLETI

### VIZSGÁLATA KIS $\kappa$ -JÚ SZUPRAVEZETŐKBEN

#### 1. Bevezetés

A kis Bi tartalmú In—Bi ötvözetek kis Ginzburg—Landau-paraméterrel rendelkeznek. Vizsgálatuk abból a szempontból fontos, mert értékes információkat szolgáltat közvetlenül a II-es típusú szupravezetés megjelenésekor létrejövő átmeneti körülményekről.

Kísérleteink során [95] különböző módszerekkel vizsgáltuk a kis  $\kappa$ -jú In—(0—5 at %) Bi ötvözetek szupravezetési tulajdonságait. Meghatároztuk a kritikus hőmérséklet, a kritikus mágneses terek és a GL paraméter koncentráció függését, a kritikus terek hőmérséklet függését és  $T_c$  nyomás függését. Megállapítottuk, hogy egy kritikus  $C_c$ -koncentrációnál olyan speciális fázisátalakulás zajlik le, amelynél az I-rendű szupravezetés II-rendűbe megy át.

Megvizsgáltuk ezen ötvözetek flux flow állapotát. Azt tapasztaltuk, hogy a  $C > C_c$  esetén kialakuló állapot dinamikus mágneses tulajdonságai eltérnek a szokásos magas  $\kappa$ -jú anyagok sajátosságaitól, amennyiben a fellépő fluxus mozgás bizonyos specifikumokkal rendelkezik. E jellegzetességek mind a flux flow ellenállás mágneses tértől való függésére, mind a feszültség-áram jelleggörbék alakjára vonatkoznak.

#### 2. Vizsgálati eljárások, mérőberendezés

A kísérleti vizsgálatokat 0—5 at % Bi koncentrációjú In—Bi mintákon végeztük. Az ötvözetek igen nagy tisztaságú (99,9999 % és 99,999 %) fémes In-ból és Bi-ből készültek.

Olyan mintákat kellett készíteni, amelyek kis kritikus áramúak, hogy elkerüljük a disszipációs hatásokat vagy a minták felmelegedését. Ezt egyrészt vékony minták előállításával, másrészt megfelelő hőkezeléssel értük el. A hőkezelt minták kritikus áramértékét főként a Bi atomokon való rögzítődés határozta meg, amit az is alátámaszt, hogy a nagyobb Bi-tartalmú minták magasabb kritikus áramokkal rendelkeztek.

Abból a célból, hogy minél jobb homogenitást érjünk el, különböző mintakészítési eljárásokat dolgoztunk ki.

1. Az egyszerű előállítási módszernél a szükséges In és Bi mennyiségek kimérése után a komponenseket egy üveghengerben 250—300 °C hőmérsékleten összeolvasztottuk. Ezt a műveletet vagy  $10^{-6}$  hgmm vákuumban, vagy 1—10 hgmm argon atmoszférában végeztük. Ezután az olvadékot gyorsan lehűtöttük, és egy-egy hegyer alakú In—Bi rudat nyertünk. A kapott ötvözetet üveglapok között néhány fokkal olvadáspontja fölé melegítve, az ily módon előállított olvadékból az üveglapok össze-



nyomásával vékony lemezeket formáltunk. Az üveglapokat előzőleg krómkénsavval le kell tisztítani és szilikon olaj emulziót (Silor- EPH, Finomvegyszer Szövetkezet, Budapest) kell rájuk égetni.

A precíz kémiai analízis azonban az így kapott mintákban jelentős makroszkopikus inhomogenitásokat mutatott ki. Ezek mértéke elérte az 5–25 relatív %-ot, amin a hőkezelés nagyon keveset változtatott.

2. Ha olvasztás közben hangfrekvenciás rázásnak, illetve ultrahangos keverésnek vetettük alá az anyagot, ez egy nagyságrenddel megnövelte a homogenitást. Az e célra kialakított berendezés, illetve eljárás segítségével az inhomogenitást 2–3-rel %-ra sikerült lecsökkenten. Az itt alkalmazott hőkezelés abból állott, hogy a kész mintákat 8–10 órán át az olvadáspontjuknál néhány fokkal alacsonyabb hőmérsékleten, vákuum alatt tartottuk.

3. Nagyon homogén anyageloszláshoz lehet jutni, ha megfelelő oldatból elektrolízis révén, vagy párologtatással állítunk elő mintákat.

A mintákat  $\Gamma$ -alakúra vágtuk ki. Az áram-kontaktusok In-ból, a feszültség-kontaktusok Wood-fém-ből készültek. A mérőminták hasznos méretei a következők voltak: hosszúság 5–8 mm, szélesség 1–1,5 mm és vastagság 50–100  $\mu$ . A szoba-hőmérsékleti ellenállás viszonya a hélium hőmérsékletihez 3–5 között volt.

Az előállított szilárd oldatok kritikus hőmérséklete a jól kezelhető folyékony hélium tartományba esik. Ily módon a tapasztalt kísérleti tények könnyen összevetethetők a GLAG elmélet eredményeivel és egyéb teoretikus, illetve empirikus formulákkal.

A mérések számára fém-üveg kombinált kriosztátot készítettünk. Az általunk épített hőmérséklet-szabályozó berendezés segítségével a hőmérsékletet  $2 \cdot 10^{-3}$  fok/óra stabilitással tartottuk fent és  $1 \cdot 10^{-3}$  fok pontossággal mértük. A hőmérséklet mindenkor értékét a He-folyadék telített gőzének nyomása, illetve Ge-hőmérő (Scientific Instruments, Inc., Lake-Worth, Florida, USA) ellenállása alapján határoztuk meg. A két módszer egymásnak jól megfelelő értékeket adott.

Az átfedett hőmérséklet-tartomány 1,63 K-től a mindenkor aktuális  $T_c$ -ig terjedt.

A folyékony He forráspontjánál alacsonyabb hőmérsékleteket a hélium gőztér szivattyúzásával értük el, amelynél a nyomás stabilitás érdekében nyomásszabályozót alkalmaztunk.

Hőmérséklet-szabályozó berendezésünk (amelyet más vizsgálatainknál is alkalmaztunk) teljesítőképessége [96] az említett adatoknál lényegesen jobb mutatókat produkál, azonban jelen méréseinknél elegendő volt e pontosság, illetve stabilitás fenntartása.

A szabályozó rendszer 1,5–350 K hőmérsékleti tartományban képes működni, amelyen belül 1,5 K és 100 K között Ge-hőmérőt, 60 K felett pedig Pt-hőmérőt használtunk mérőérzékelőként. Az elért stabilitás az 1,5–20 K intervallumban  $5 \cdot 10^{-5}$  fok/óra, 20 K és 100 K között  $2 \cdot 10^{-4}$  fok/óra, 100 K és 300 K között  $1 \cdot 10^{-3}$  fok/óra és végül 300 K felett  $3 \cdot 10^{-3}$  fok/óra volt.

A berendezés működési elve az, hogy egy konstans frekvenciájú astabil multi-vibrátor szabályozott impulzus szélessége állítja be a hélium-kriosztátban elhelyezett mintatartó fűtési teljesítményét.

Foto-elektromos erősítő méri egy kompenzátor és az ellenállás hőmérők feszültség különbségi jelét, és vezérli a fűtés-hűtés szakaszok beállítását. A hőmérők táplálásáról hőmérséklet-szabályzóval ellátott, precíziós áramgenerátor gondoskodik.



A méréseket a lapszerű mintáknál minden esetben úgy végeztük, hogy a mágneses tér iránya merőleges legyen a minta síkjára.

Szupravezető szolenoidunk része egy alacsony hőmérsékletet, nagy mágneses teret és nagy nyomást létrehozó kombinált rendszernek [97], amely komplex vizsgálatok elvégzését teszi lehetővé.

A szolenoidot BT—65 típusú  $\text{Nb}_3\text{Sn}$  drótból tekercseltük, aminek a nominális kritikus árama 45 Amper. A mágnes hossza 88,2 mm, külső átmérője 66,5 mm, belső hasznos tere 25,6 mm. A törzsön 9010 menet foglal helyet 34 rétegben. Ennek szoba-hőmérsékletű normál ellenállása 2357 ohm. A létrehozott maximális tér 34,8 A áramnál 45,2 kG, amely a középső részben uralkodó  $5 \cdot 10^{-3}/\text{cm}$  homogenitással állítható elő.

Az egyes rétegek között tereftalát szigetelés van, valamint kétrétegenként vékony, négy-réteges alumínium fóliából készült, és a teljes tekercshosszat átfedő védelem. Ennek kettős szerepe van. Egyrészt az, hogy normál állapotba való esetleges hirtelen átmenetkor, mivel a hosszú szupravezető drót vörösréz köpenye nagy ellenállású, az indukált áramok az alumínium fóliákban tudnak záródni. Erre azért van szükség, mert normál átmenetkor a tekercs energiáját abból nem lehet elég gyorsan kivezetni, az ott disszipálódik. Ha elegendő mennyiségű normál jóvezető fémes anyag van a tekercsben, akkor a szupravezető drót termikus túlterhelése elkerülhető. Másrészt a rövidzáró alumínium fóliák a tekercs eredő önindukcióját is lecsökkentik, amely egyébként 1 Hy lenne, és ez a nagy áram hirtelen megszakadásakor veszélyes önindukciós feszültségeket eredményezne.

A fellépő mágneses nyomások miatt a tekercs testet megfelelően szilárd, 1,5 mm falvastagságú sárgarézcsőből készítettük, amelyet 6 mm vastagságú véglapok zárnak le. A maximális térerősség közelében fellépő túlnyomások ellensúlyozására két merevítő karima szolgál, amelyeket 6 hosszanti híd fog össze.

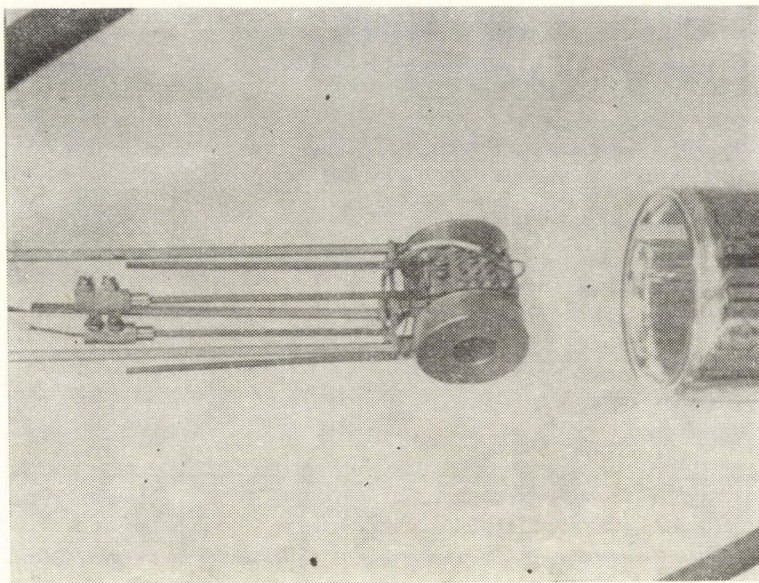
A szupravezető szolenoid táplálására maximálisan 100 A gerjesztő áramot létrehozó, nagy stabilitású, tranzisztORIZÁLT tápegységet építettünk fel. A kialakított elektronikus kapcsolás szerint a tápáram a maximális értékre változtatható módon, 5—30 perc alatt futtatható fel. Az 1 órára vonatkoztatott hosszú idejű stabilitása  $1 \cdot 10^{-3}$ , vezérlési linearitása  $2 \cdot 10^{-3}$  volt. E berendezéssel a mágneses teret egyöntetű sebességgel és folyamatosan szabályozható időkonstanssal tudjuk változtatni a megadott tartományban.

A tápegységet kiegészíti egy olyan kapcsolás, amely nagy kritikus áramú, deformált és rövid szupravezető minták védelmét szolgálja. A normál állapotba való esetleges, hirtelen átmenetnél a nagy áramok ugyanis tönkretelhetik a mintát. Ezt akadályozza meg az említett elektronikus kör oly módon, hogy a fellépő feszültség hatására 1 msec-nál rövidebb idő alatt kikapcsolja az áramot.

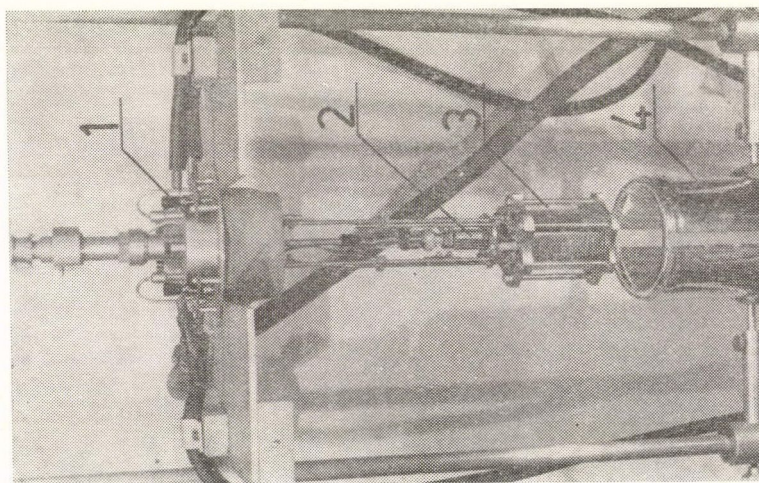
A szolenoid furatában foglal helyet a nagy nyomású bomba, amelyet nem mágneses Be-bronzból készítettünk, és 2,5% koncentrációban tartalmaz berilliumot. Külső átmérője 25 mm, hossza 120 mm, belső munkakamrájának átmérője 4 mm, hossza pedig 25 mm. A 4,2 K hélium hőmérsékleten kapott maximális nyomás értéke 18,2 kbar, amit tiszta ón minta szupravezetési átmeneti hőmérsékletének változása alapján határoztunk meg [98]. Ez az eljárás meglehetősen könnyű és pontos nyomásmérést tesz lehetővé az alacsony hőmérsékletek tartományában.

Az ón  $T_c$ -je ugyanis nagyon érzékeny a nyomásra, így pl. előbb említett intervallumban majdnem 1 fokos csökkenést mutat. A munkahenger célszerűen kikép-





4.2 ábra



4.1 ábra



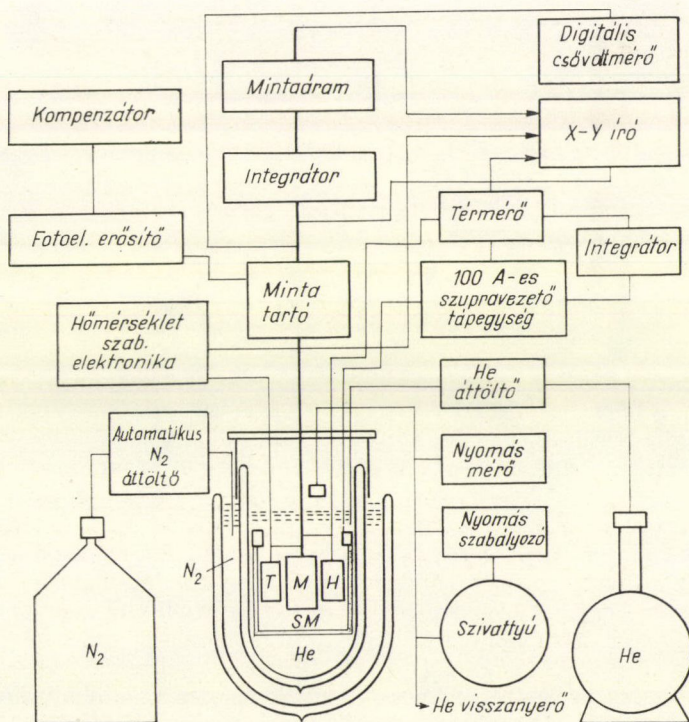
zett alakja és a bomba egész konstrukciója hosszú ideig fennmaradó stacionárius nyomásviszonyokat biztosít.

A teljes berendezést az összeszerelés stádiumában a 4.1 ábra mutatja be. Ezen 1. a kriosztát tetőt, 2. a nagynyomású bombát, 3. a szolenoidot és 4. a hélium dewart jelzi.

A későbbiekben a folyékony He fogyasztás csökkentése céljából számítógépes módszerrel egy Nb—Ti—Zr anyagú, homogén szupravezető Helmholtz-tekerceset [99] terveztünk, amelyet a 4.2 ábra szemléltet. Ez tekercsenként 46 mm átmérő mellett, 840 menetet tartalmaz. Legnagyobb gerjesztési árama 34 A, amelynél 5,5 kG mágneses teret produkál.

Az ellenállás-hőmérséklet görbéket  $x-y$  író (Cimagraph 30/40 CZ, Cimatic Electronique, Montreuil, France) segítségével nyertük, amelynek  $x$ -tengelyére a Ge-hőmérő feszültségét,  $y$ -tengelyére pedig a minta jelét kapcsoltuk.

A mágnesezési görbék méréséhez 25 mm hosszú 1 mm átmérőjű hengeres mintákat használtunk. A mintát tartalmazó mérő-tekercsből és a vele szembekötött, azonos méretű etalontekercsből álló rendszeren fellépő különbségi jelet detektáltuk. A görbéket elektronikai integrátor technikával [100] kaptuk meg.



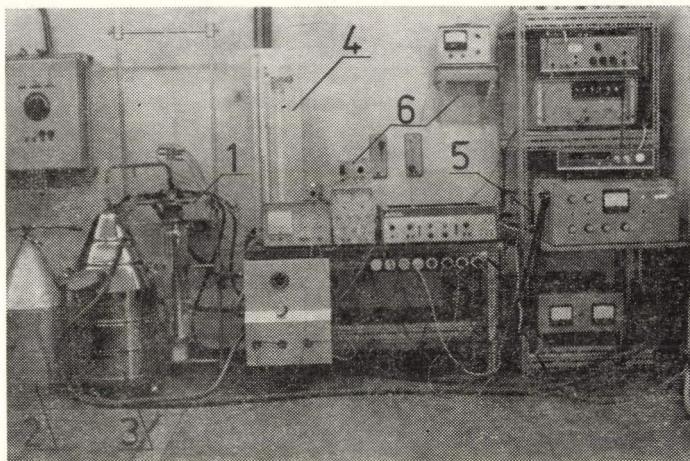
$M$  = minta,  $T$  = hőmérő,  $H$  = termérő,  $SM$  = szupravezető mágnes

4.3 ábra



A  $H_{c2}$  kritikus mágneses tér értékeit közvetlen mérésel is meghatároztuk.

A flux flow méréseket állandó hőmérsékleteken végeztük oly módon, hogy a külső mágneses teret, mint paramétert változtatva,  $x-y$  rekorderrel felvettük a feszültség — áram karakterisztikákat.



4.4 ábra

A teljes mérőberendezés bloksémáját a 4.3 ábrán, fényképét a 4.4 ábrán mutatjuk be. Az alkalmazott jelek közül 1. a kriosztátot, 2. a  $N_2$  dewart, 3. a He tárolót, 4. a nyomásszabályozót, 5. a szupravezető mágnesek tápegységét, és a 6. a mérő elektronikát jelenti.

### 3. $T_c$ és $\kappa$ függése az ötvöző koncentrációtól

Az elvégzett mérések szerint a vizsgált koncentráció tartományban az In—Bi minták kritikus hőmérséklete 3,398 K-től 4,462 K-ig változik. Az előbbi érték 0 at %, az utóbbi pedig 5 at % Bi tartalomra vonatkozik.

A 4.5 ábra azt mutatja, hogy a kritikus hőmérséklet monoton növekvő módon függ a koncentrációtól. Az is látható, hogy a  $T_c - C$  görbének három, egymástól jól megkülönböztethető szakasza van. Az első, görbült ág 1,5%-ig tart, ezt követi egy meredek és majdnem lineáris tartomány mintegy 2,5%-ig, majd a jóval kisebb emelkedésű záró rész. A görbe karakterét korábbi vizsgálatainkkal [91], [93] összevetve úgy tűnik, hogy a középső meredek tartomány kialakításában a szennyezések miatt a Fermi-felületben fellépő topológia változás játsza a fő szerepet.

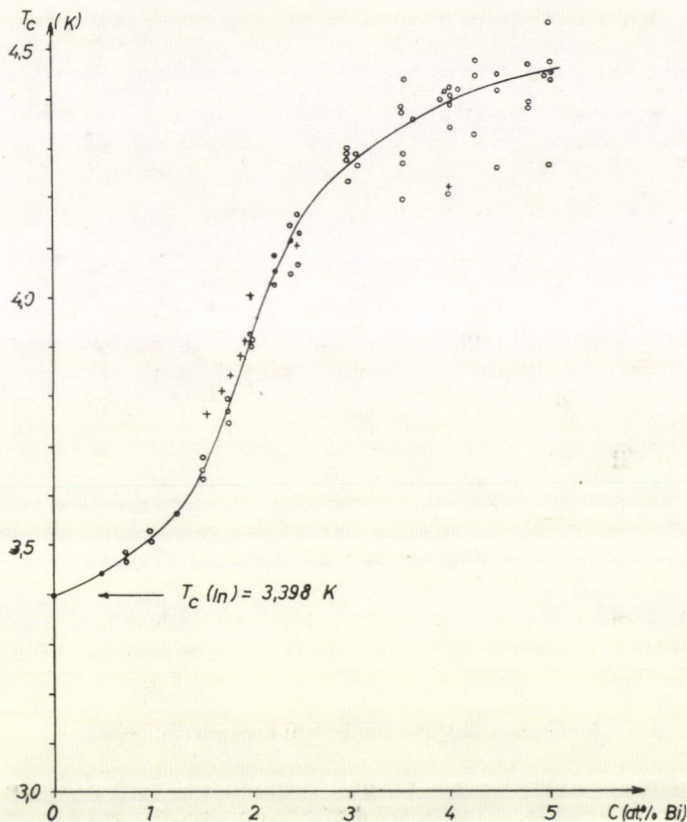
Mérési pontjaink Kinsel et al. [101], [102]  $T_c$  értékeinél (a 4.5 ábrán +tel jelölve) általában mélyebben fekszenek. Ennek oka valószínűleg az általunk előállított minták magas homogenitásában keresendő.

Seraphim et al. [103] egy empirikus formulát írt fel a  $T_c$  koncentráció függésére

$$\Delta T_c = T_c - T_{c0} = k_1 x + k_2 x \ln x, \quad (4.1)$$



ahol  $T_c$  az ötvözet,  $-T_{c0}$  a tiszta alapanyag kritikus pontja,  $k_1=101,5$  és  $k_2=17$  konstansok,  $x$  pedig a móltört. Ez a képlet ugyan visszaadja a  $T_c-C$  görbe növekvő tendenciáját, azonban mind a mi saját-, mind *Kinsel* adataitól lényegesen eltérő numerikus értékeket szolgáltat.



4.5 ábra

Vizsgálataink azt mutatták, hogy a szereplő faktorok nem függetlenek a koncentrációtól, és a (4.1) formula analitikus alakja csak akkor tartható meg, ha a megjelölt koncentráció tartományokra a 4.1 táblázat átlagértékeit fogadjuk el.

Nagynyomású bombánk segítségével megvizsgáltuk a  $T_c$  nyomásfüggését is [104]. Azt tapasztaltuk, hogy lényegében függetlenül a koncentrációtól a  $T_c-P$  kapcsolatot a 4.6 ábrának megfelelő  $-\frac{dT_c}{T_c}$   $\sim P$  reláció szemlélteti a kísérleti tényekkel egyezésben.

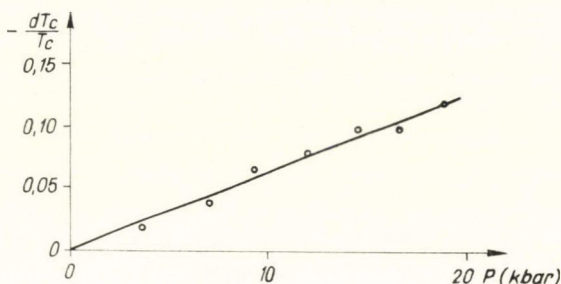
Az egyes minták mágneses momentum-mágneses tér ( $M-H$ ) görbéit általá-

4.1 TÁBLÁZAT

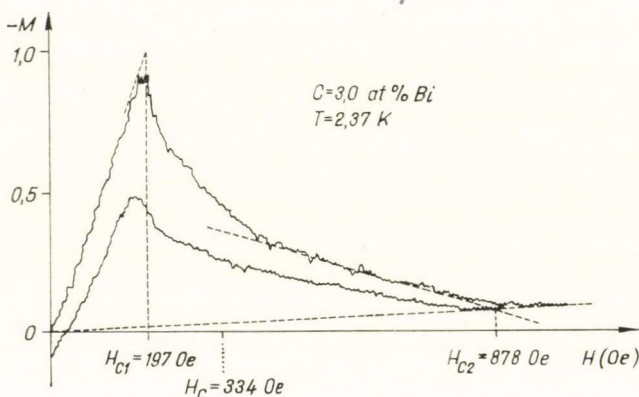
Koncentráció tartomány	$k_1$	$k_2$
0,0—1,5 at %	38,2	5,8
1,5—2,5 at %	147	31
2,5—5,0 at %	-23,7	-13,2

ban 7–12 különböző hőmérsékletnél vettük fel. Közülük egy tipikusát a 4.7 ábra szemlélteti. Ez In—3,0 at % Bi ötvözetre vonatkozik 2,37 K hőmérsékletnél.

A két görbe közül a felső a növekvő, az alsó a csökkenő mágneses térhez tartozik. A felső görbe felfutó ágán jól látható kezdeti lineáris szakasz van (hasonlóan,



4.6 ábra



4.7 ábra

mint az I-es típusú szupraveztőknél), amely  $H_{c1}$ -nél élesen megtörik. A lemenő ág enyhe görbületben folytatódik.  $H_{c2}$  értéket a növekvő és a csökkenő  $H$ -hoz tartozó görbék érintőinek metszéspontjával vettük egyenlőnek. (Ez eltér a Kinsel és mások által alkalmazott eljárástól.)

A visszafelé haladó, alsó görbe a felsőhöz viszonyítva jól megfigyelhető hiszterézist mutat, amely mintegy 10–15 % maradék mágneses fluxust takar. Ennek okát valószínűleg a mérőmintákban levő mikroszkopikus inhomogenitások, rácsdefektusok, vagy egyéb tökéletlenségek szolgáltatják.

$H_c$  — termodinamikai kritikus mágneses tér nagyságát a felső  $M-H$  görbe alatti területből számítottuk ki azzal a feltételezéssel, hogy a felfutó ághoz  $\chi = -\frac{1}{4\pi}$  szuszceptibilitás rendelhető.



A szupravezetés jellege, illetve rendűsége a  $\kappa$ -paraméter nagysága alapján dönthető el. Maradék ellenállás méréseink lehetőséget adtak arra, hogy rövid átlagos elektron szabad úthosszal rendelkező mintáink  $\kappa$ -értékeit a Gorkov—Goodman-[20], [105] reláció

$$\kappa = \kappa_0 + 7,5 \cdot 10^3 \cdot \gamma^{1/2} \cdot \varrho_n \quad (4.2)$$

alapján megbecsülhessük. A formulában  $\kappa_0$  az ötvözet kiinduló anyagának GL paramétere, amely tiszta In esetén  $\kappa_{\text{In}} = 0,112$  [106],  $\gamma$  a normál elektron fajhő Sommerfeld-koefficiense (esetünkben  $\gamma_{\text{In}} = 1,61$  m Joule/mol fok<sup>2</sup> =  $3,04 \cdot 10^3$  erg/cm<sup>3</sup> fok<sup>2</sup> [107], ami a vizsgált koncentráció tartományban 6,2%-ot változik), és  $\varrho_n$  a maradék ellenállás ohm cm-ben.

A maradék ellenállás méréseinkkel nyert koncentráció függését a 4.2 táblázat mutatja be.

A  $\kappa$  koncentráció függésének meghatározására emellett a  $H_{c1}-T$ , illetve az  $M-H$  görbék menete alapján a GLAG elmélet még két megbízható összefüggést szolgáltat:

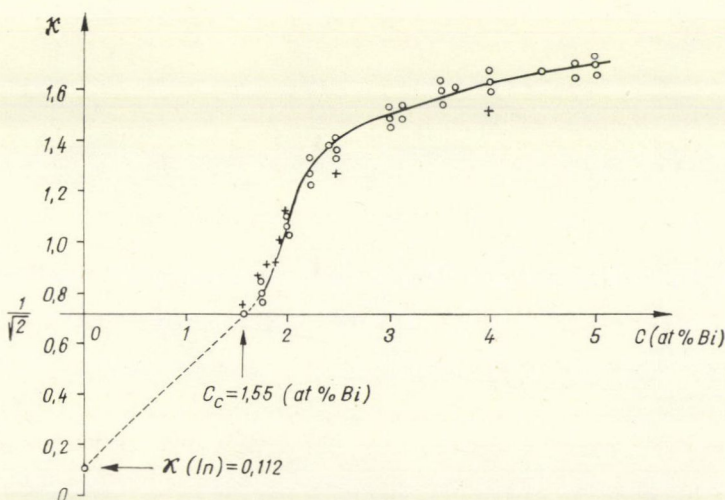
$$\sqrt{2} \kappa = \frac{H_{c2}}{H_c} = \frac{(dH_{c2}/dT)_{T_c}}{(dH_c/dT)_{T_c}} \quad (4.3)$$

$$4\pi \left( \frac{dM}{dH} \right)_{H_{c2}, T_c} = \frac{1}{1,16(2\kappa^2 - 1)}. \quad (4.4)$$

4.2. TÁBLÁZAT

Koncentráció (at %)	$\varrho_n \cdot 10^{-6}$ (ohm cm)
1,75	1,59
2,0	2,12
3,0	3,24
4,0	3,57
5,0	3,72

A három módszer egymástól csak nagyon kevésbé eltérő adatokat szolgáltatott, kis  $\kappa$  paraméterek esetében is igazolva a GLAG elméletet. A kapott értékeket a 4.8 ábrán foglaljuk össze.



4.8 ábra

#### 4. Egy új típusú fázisátalakulás

A görbéből látható, hogy a Bi tartalom növelésekor  $\kappa$  monoton növekszik, és lesz egy olyan  $C_c$  kritikus koncentráció, amelynél éppen eléri a  $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} = \kappa_c$  kritikus értéket. Ennél a koncentrációnál a korábban I-es típusú szupravezetés (Meissner-állapot) II-es típusúba (kevert állapot) megy át.

Felismertük [108], hogy ez az átmenet egyfajta speciális, másodrendű fázisátalakulásnak tekinthető, amelyet az alábbi tulajdonságok jellemeznek:

1. A szupravezetést leíró rendparaméter, a fellépő szupravezető és normál tartományoknak megfelelően, inhomogenizálódik. Külső áram jelenlétében emellett még anizotroppá is válik.

(Hasonló viselkedést mutat a vektorpotenciál is.)

2. A szupravezetés felületi jelenségéből térfogatívá válik (a külső tér a és transzport áram behatol az anyagba).

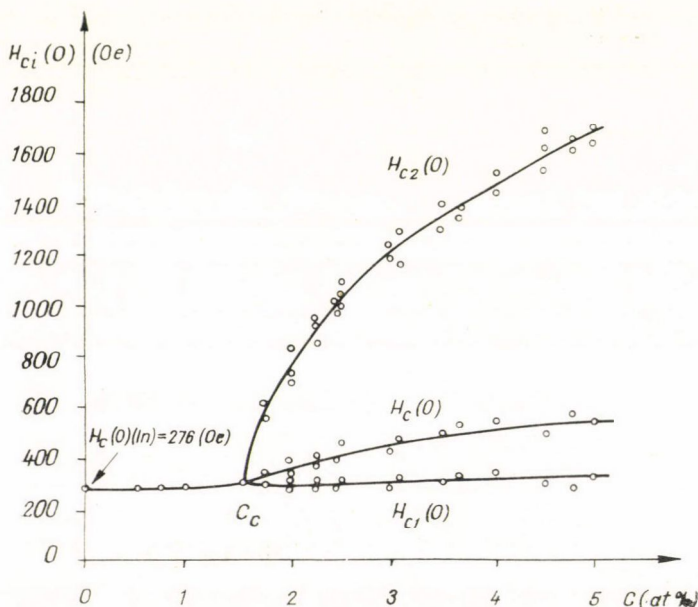
3. A korábban létező egyetlen  $H_c$  kritikus mágneses tér helyett  $H_{c1}$  és  $H_{c2}$  kritikus terek együttesen határozzák meg a mágneses penetrációt.

4. Hirtelen változás jön létre a termodinamikai entrópia mátrixban.

5. Gyors változás áll be a makroszkopikus vezetési mátrixban.

E változások tükrözik az elektronszerkezetben fellépő átalakulást, amely szerint a fázisátalakuláskor az elektrópárok mellett egyes elektronok is megjelennek.

A  $\kappa - C$  görbe 1,55 at % Bi tartalomnál metszi a  $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$  alapvonalat, tehát



4.9. ábra



$C_c = 1,55$  at % az a kritikus koncentráció, amelynél a szupravezetés típus váltása megtörténik. E pont felett  $x$  a koncentrációval kezdetben erősen, majd gyengébben növekszik és értéke 5 at %-nál 1,68 lesz.

(Az ábrán  $+$ -lel jelöltük *Kinsel et al.* adatait, amelyek kis koncentrációknál közel esnek a mieinkhez, 2,5 at %-nál és 4 at %-nál azonban mintegy 7,5%-kal különböznek tőlük.)

A létrejövő fázisátmenet legfontosabb adatai a kritikus mágneses terek. Az extrapolálással  $T=0$  K-hez illesztett  $H_{ci}(0)$  értékeknek a Bi-koncentrációtól való függését a 4.9 ábra szemlélteti [109].

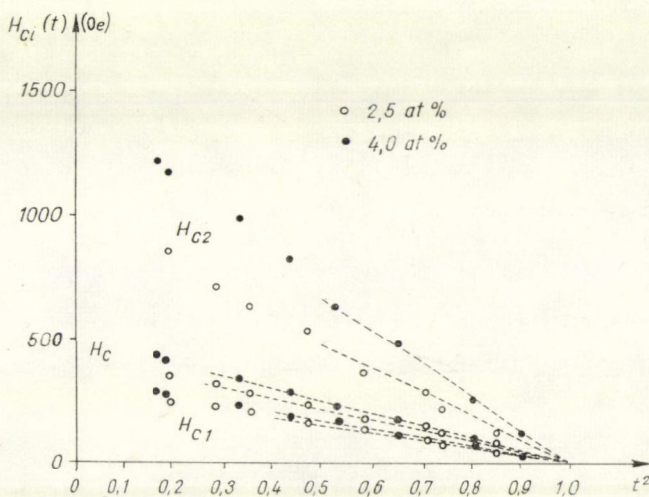
A 0—1,5 at % Bi tartalmú, I. rendű szupravezető In—Bi ötvözetek  $H_c(0)$ -ja a tiszta In 276 Oe-es  $H_c(0)$ -jához képest ebben az intervallumban mindössze 6,5 %-ot változik.  $C_c = 1,55$  at % környezetében a kapott mágneses tér értékek meglehetősen nagy fluktuációt mutatnak. A II. rendű szupravezetés fellépését kísérő növekedés eredményeként az 5 at %-os Bi tartalomnál  $H_{c1}(0)$  értéke 323 Oe,  $H_c(0)$ -é 544 Oe és végül  $H_{c2}(0)$ -é pedig 1682 Oe lesz.

### 5. $H_{ci}$ függése a hőmérséklettől

A 4.10 ábrán két különböző koncentrációnál (2,5 at % és 4,0 at %) a  $H_{ci}$  görbék  $T$ -függését mutatjuk be. Amint várható, a  $T_c$  közelében

$$H_{ci}(t) = H_{ci}(0)(1 - t^2), \quad (4.5)$$

ahol  $t = T/T_c$ , azonban alacsony hőmérsékleteknél, elsősorban a  $H_{c2}$  menete szemmel láthatóan eltér ettől a formulától, és  $t = 0,5$  alatt a (4.5) már nem írja le helyesen a  $H_{c2} - T$  görbét. (Ez vonatkozik a teljes vizsgált Bi-tartalom intervallumra.)



4.10. ábra

Az idevonatkozó „klasszikus” elméleti megoldások közül *Gorkov* [20] a BCS-elmélet alapján, Green-függvényes technikával jutott a

$$H_{c2}(t) = \kappa(T_c) H_c(0) (1,77 - 2,20t^2 + 0,50t^4 - 0,07t^6) \quad (4.6)$$

formulára, *Ginzburg* [110] és *Bardeen* [111] makroszkopikus formalizmus felhasználásával kapták azonos alakú

$$H_{c2}(t) = 2\sqrt{2}\kappa(T_c) H_c(0) \frac{1-t^2}{1+t^2} \quad (4.7)$$

eredményüket, *Sapoval* [112] pedig a *Gorkov*-elmélet révén nyerte

$$H_{c2}(t) = 3,03 \kappa(T_c) H_c(0) \alpha(t) \quad (4.8)$$

képletét, ahol  $\alpha(T_c)=0$  és  $\alpha(0)=1$ .

E formulákkal  $T=0$  K-nél összehasonlítva a kísérleti eredményeket, *Gorkov* eredményével nagyon jó egyezést kapunk és az

$$f(T=0) \equiv \frac{H_{c2}(0)}{H_c(0)} = 1,77 \kappa(T_c) \quad (4.9)$$

reláció az egész vizsgált koncentráció tartományban helytállónak bizonyult. Ennek szemléltetésére a 4.3 táblázatunkban a 4.9 és a 4.10 ábra segítségével (4.9) bal és jobb oldalára kapott numerikus adatok és ezek eltérésének a koncentrációtól való függését adjuk meg.

4.3 TÁBLÁZAT

C (at %)	$f(T=0)$	$1,77 \cdot \kappa(T_c)$	Eltérés %
1,75	1,71	1,42	- 16,9
2,00	2,06	1,86	- 9,7
2,50	2,41	2,44	+ 1,2
3,00	2,60	2,65	+ 1,9
4,00	2,90	2,87	- 1,0
5,00	3,09	2,98	- 3,6

Ezzel szemben a mért értékektől a *Ginzburg*—*Bardeen*-reláció 27%—133%-os eltérést, a *Sapoval* formula pedig 34%—155%-os eltérést mutat az előbbi koncentráció tartományban.

Feltéve, hogy  $H_c$ -nek a  $T$ -függését a (4.5) formula helyesen írja le, az

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{H_{c2}(t)}{H_c(t)} = \kappa(t) \quad (4.10)$$

alapján az előző relációk megadják a GL-paraméter  $T$ -függését az alábbi formában

$$\kappa(t) = (1,25 - 0,30t^2 + 0,05t^4) \cdot \kappa(T_c) \quad (4.6')$$

$$\kappa(t) = \frac{2}{1+t^2} \kappa(T_c) \quad (4.7')$$

$$\text{és } \kappa(1)=\kappa(T_c), \text{ illetve } \kappa(0)=2,14 \cdot \kappa(T_c). \quad (4.8')$$



A kísérleti tapasztalatokkal való összehasonlítás ismét a (4.6') Gorkov-formula

$$\frac{H_{c2}(t)}{H_c(t)} = (1,77 - 0,43t^2 + 0,07t^4) \cdot \kappa(T_c) \quad (4.6'')$$

mellett dönt, amely szerint a  $H_{c2}/H_c$ -arány a teljes  $T$  intervallumban nem változik lényegesen. A Gorkov-egyenlettől való szisztematikus eltérést kísérleteink során nem tapasztaltunk. Szemben ezzel, viszont a (4.7') Ginzburg—Bardeen-, illetve a (4.8') Sapoval-reláció erősen eltér a mérési eredményektől.

A különböző elméleti megfontolások a már említetteken kívül is szolgáltatnak a mérési adatokkal összehasonlítható eredményeket. Közülük *Mühlschlegel* [113] a kondenzációs energiából számolva, általánosan a

$$H_c(0) = 2,44 \cdot \gamma^{1/2} T_c \quad (4.11)$$

összefüggést kapta, amely kvalitatíve helyesen tükrözi a  $T_c$ -nek és a  $H_c(0)$ -nak a Bi-koncentrációval együtt való növekedését.

A GLAG-elmélet szennyezett szupravezetőkre, kis szabad úthosszak esetén a

$$H_{c2}(0) = 2,6 \cdot 10^4 \cdot \gamma T_c \varrho_n \quad (4.12)$$

képlet szolgáltatja, amelyben  $T_c$  és  $\varrho_n$  növekedése együttesen fedezi  $H_{c2}(0)$  növekedését. Az általunk lefedett koncentráció tartományban  $H_{c2}(0)$  növekedési aránya nagyobb, mint a  $T_c \cdot \varrho_n$  párosé.

*Helfand* és *Werthamer* [114] kis szabad úthosszaknál alkalmazható

$$H_{c2}(0) = 0,693 \cdot \left( \frac{dH_{c2}(t)}{dt} \right)_{t=1} \quad (4.13)$$

formulája a  $H_{c2}-T$  görbék egy egyszerűsített relációval kívánja leírni, amely a görbe  $T_c$ -nél való viselkedéséből próbál következtetni a kezdő értékre. A kísérleti tényekkel kvalitatív összhangban van, amennyiben a nagyobb  $T_c$ -beli iránytangens nagyobb  $T=0$  K-beli  $H_{c2}$ -re utal.

Annak ellenére, hogy vizsgálatainkat kis  $\kappa$ -jú anyagokon végeztük, *Echarri et al.* [115] eredménye, amely szerint

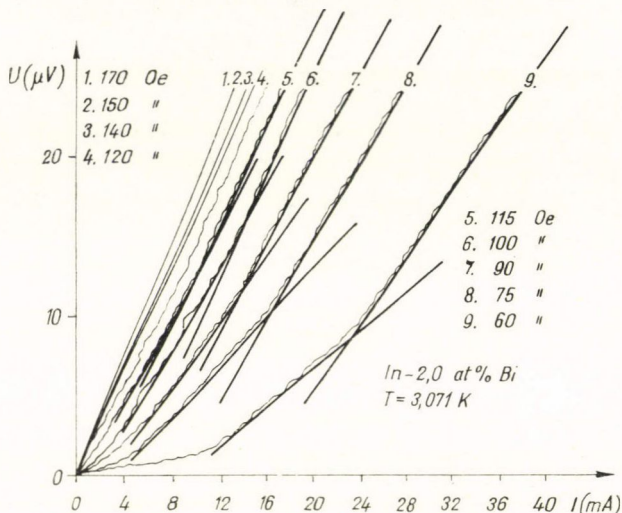
$$H_{c1}(0) = \frac{150,5}{\varrho_n} T_c \ln(1,15 \cdot 10^{-2} \cdot \varrho_n \gamma^{1/2}) \quad (4.14)$$

a 2–5 at %-os tartományban elfogadhatóan tükrözi a kísérleti eredményeket. Ennek alapján várható, hogy becslés céljából magasabb koncentrációkra is ki lehet terjeszteni.

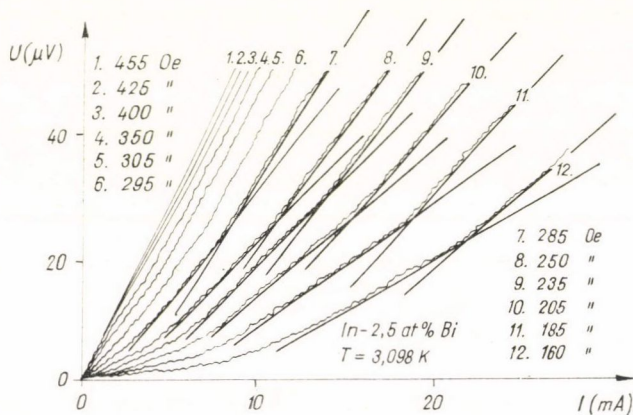
## 6. Specifikus fluxus áramlás

A 4.11, 4.12 és 4.13 ábra a 2 at %, 2,5 at % és 4 at % Bi tartalmú ötvözetek flux flow állapotának tipikus feszültség-áram karakterisztikáit mutatja be, amelyeket  $x-y$  rekorderrel kaptunk oly módon, hogy a mintákon növekvő áramokat bocsátottunk keresztül. A görbéket különböző mágneses tereknél vettük fel.

A grafikonokon háromféle jellegzetes részlet van: amíg a pinning erők hatásosan rögzítik a vortexeket, addig feszültség nem keletkezik (és nincs ellenállás), ezután a görbült szakasz jelzi a flux creep állapotot, és végül a lineáris tartományokban az örvények a belső súrlódási együtthatónak megfelelő, állandó sebességgel mozognak.



4.11 ábra



4.12 ábra

A görbéken jól látható, és matematikai analízisük is azt mutatja, hogy az egyes karakterisztikákhoz nem egy, hanem két különböző görbület és két lineáris szakasz tartozik [116].

Kiszámítva az egyes mágneses terekhez tartozó iránytangenseket, és a mágneses tér függvényeként ábrázolva őket, a  $\rho_v - H$  jelleggörbéket kapjuk, amelyek külön-

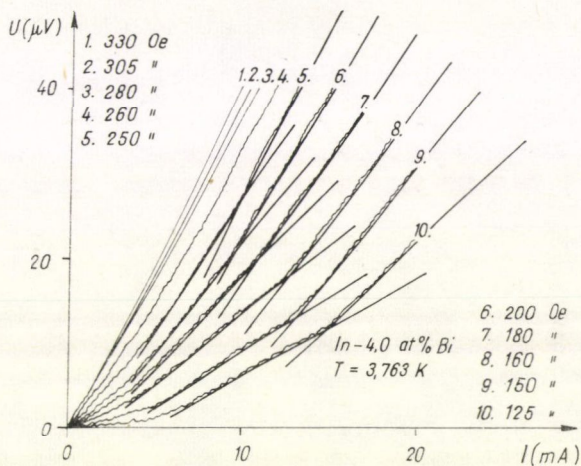


böző hőmérsékletekhez tartoznak. A 4.14, 4.15 és 4.16 ábrán közülük ábrázoltunk néhányat, amelyek a 2 at %-os, 2,5 at %-os és 4,0 at %-os ötvözeteket jellemzik. Az ábrákon konkrétan az azonos feszültség értékekhez tartozó relatív ellenállások mágneses tértől való függését mutatjuk be.

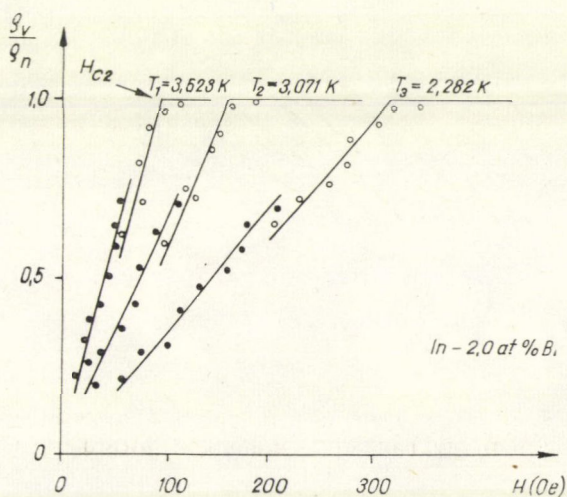
Az általunk kapott flux flow ellenálláseredmények jól egyeznek a

$$\frac{Q_v}{Q_n} = \frac{H}{H_{c2}(t)} - K \quad (4.15)$$

formulával, amely a mért értékek függését a  $T$ -től és  $H$ -tól helyesen írja le. Ez a kifejezés eltér Kim et al. [71] empirikus formulájától, mert egyrészt az itt szereplő



4.13 ábra

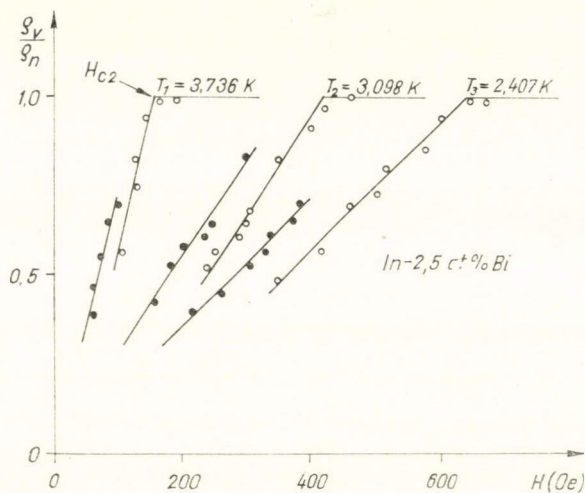


4.14 ábra

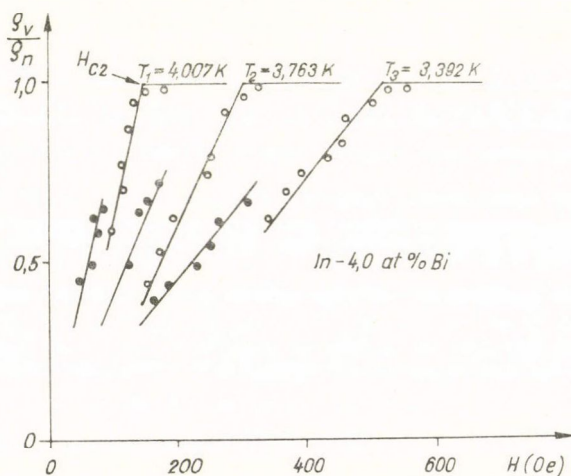
felső kritikus mágneses tér függ a hőmérséklettől, másrészt még a  $K$  addíciós tag is szerepel benne.

Az eltérés valószínűleg abból adódik, hogy amíg a mi kísérleteinkben  $\kappa \sim 1$  volt, ők olyan anyagokon vizsgálták a fluxus fonalak mozgását, amelyek  $\kappa \gg 1$  GL paraméterekkel rendelkeztek.

A (4.15) típusú formula a feszültség-áram karakterisztikák mindkét lineáris szakaszán leírja a flux flow ellenállást. Az első lineáris tartományban  $K$  véges értékű, a másodikban pedig zérus.



4.15 ábra



4.16 ábra



E mérések lehetőséget adnak a második kritikus mágneses tér hőmérséklet-függésének meghatározására is.

Az eredmények azt mutatják, hogy a kapott értékek átlagosan 8–10%-kal felülmúlják a közvetlen  $H_{c2}$ -mérésekből, illetve az M—H mérésekből származó adatokat. Ez egyaránt vonatkozik az egyes koncentrációkhoz tartozó  $H_{c2}(0)$  és  $H_{c2}(T)$  mennyiségekre.

## 7. Következtetések

Az elvégzett vizsgálatokból néhány fontos következtetésre lehet jutni. Ezek, röviden az alábbiakban foglalhatók össze:

1. Alkalmas  $\kappa = \kappa(T)$  bevezetésével a GLAG elmélet a kísérleti tapasztalatokkal egyezően írja le a jellemző paramétereket és azok változását a nagyon kis  $\kappa$ -jú ötvözetek esetén is az egész hőmérséklet tartományban.

2. Az ötvözesi koncentráció növelésével  $C_c$ -kritikus értéknél az I-típusú szupra-vezetés II-típusúba megy át. A mágneses jelleggörbék precíz analízise szerint bármely  $T$ -függő  $\kappa$  esetén és bármely hőmérsékletnél ez a fázisátalakulás mindig  $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$ -nél

jön létre. Emiatt ez a GL parométer kritikus értékének tekinthető.

3. A flux-flow vizsgálatok azt mutatják, hogy a feszültség-áram karakterisztikákon megjelenő kétfajta görbület és két lineáris tartomány kétféle kritikus áramot és kétféle flux flow ellenállást jelez, ahol a flux flow ellenállások a hőmérséklet-függő kritikus mágneses térrel írhatók le.

4. Ez arra utal, hogy a külső erő hatásának kitett mágneses örvények egyik része már mozgási állapotba kerül akkor, amikor a másik részük még rögzítve van.

5. További vizsgálatok végzése 1 at % és 2 at % koncentráció között látszik racionálisnak. Ezek nagyon finoman beállított Bi-tartalmú és nagyon homogén mintákat igényelnek. Az várható tőlük, hogy a kapott információkat tovább pontosítják és még precízebb ismereteket szolgáltatnak a fázisátmenet jellegéről.

## V. rész

### A VORTEX MOZGÁS ELMÉLETI VIZSGÁLATA

#### 1. Bevezetés

E fejezetben a vortex mozgással kapcsolatban két problémát vetünk fel és két, különböző vizsgálatunkat ismertetjük. Ezek a flux creep, illetve flux flow mozgásra vonatkoznak. Az első a flux creep állapot kvazi-elasztikusan kötött vortex modelljét, a második a kritikus állapot többkomponensű modelljét írja le.

#### 2. A flux creep állapot kvazi-elasztikusan kötött vortex modellje

Amint már említettük,  $H_{c1} < H < H_{c2}$  külső mágneses térnél kialakuló egyensúlyi vortex eloszlást a  $j_Q$ -transzport áram megbontja. Ha  $j_Q > j_{Qc}$ -kritikus áram, akkor előáll a vortexek konvektív mozgást tartalmazó flux flow állapot. Valamely aktiváció révén azonban a rögzítő pinning centrumokhoz viszonyítva a vortexek már  $j_Q < j_{Qc}$  esetén is elmozdulhatnak.

A flux creep állapot jellemzésére kidolgozott modellünket a vortex elmozdulással arányos, visszahúzó erő felismerésére alapoztuk [117]. Ennek felhasználásával a II-es típusú szupravezetőbe bevezetett, külső áram hatására fellépő nem-egyensúlyi vortex eloszlás kiegyenlítődsét tekintettük a flux creep állapot közvetlen kiváltó okának.

Ha a vortexek a saját pinning centrumuktól  $x$  távolságra mozdulnak ki, ezt a mozgást írjuk le az

$$m_v \ddot{x} - \eta \dot{x} = -f_p^d x \quad (5.1)$$

egyenlettel, ahol  $m_v$  az egyes vortexhez rendelhető tömeg,  $\eta$  a belső súrlódási együttható és  $f_p^d$  a direkciós pinning erő. Ezen egyenlet megoldása

$$x = x_0 e^{-\eta t} e^{i(\omega_v t + \varphi_v)} \quad (5.2)$$

amely — amint jól ismert — csillapított harmonikus rezgőmozgást ír le, ahol  $\varphi_v$  a fázis,  $t$  az idő.

Ha a fázisokról feltételezzük, hogy pillanatnyi értékük véletlenszerű eloszlást mutat, azaz minden egyes vortexre más és más, akkor ez a megoldás sok vortex esetében nem ad makroszkopikus változást. Az adott időpontban fellépő vortex elmozdulások makroszkopikus méretekben kompenzálják egymást. Az egész anyagmintára nézve a vortex eloszlás egyensúlyi marad.

*Anderson flux bundle koncepciójának* [84] felhasználása azonban megoldja ezt a problémát. Eszerint, mivel az egyes vortex szála szerkezete  $\lambda$  távolságig terjed ki, a



$\lambda$ -n belüli vortexek együttesen, köteggként kezelhetők. Ily módon a  $\lambda$ -sugarú kötegben levő vortexeknek kollektívan kell mozogniuk. Ebből a köteget együttesen rögzítő,  $F_p^d$ -direkciós pinning erő nagysága is megbecsülhető, mert ez arányos lesz az elmozdulást éppen létrehozó  $j_Q^*$  áram nagyságával:

$$F_p^d = \frac{1}{c} \lambda^2 n_v^0 \Phi_0 j_Q^*, \quad (5.3)$$

ahol  $n_v^0$  az egysúlyi vortex sűrűség,  $\Phi_0$  az elemi mágneses fluxus.

Ennek figyelembevételével és általános mozgás irányt feltételezve, a kvazi-elasztikusan kötött vortex köteg egyenlete

$$M_v \ddot{r} - \eta \dot{r} = -F_p^d r, \quad (5.4)$$

amelynek megoldása  $t=0$ -ban  $\varphi=0$  kezdőfázisból indulva ki

$$r = r_0 e^{-\eta t} \sin \omega_v t. \quad (5.5)$$

Ebből a rezgési frekvenciára, illetve a periódus idő kifejezésére az

$$\omega_v = \sqrt{\frac{F_p^d}{M_v}} \quad \text{és} \quad \tau_v = 2\pi \sqrt{\frac{M_v}{F_p^d}} \quad (5.6)$$

összefüggés nyerhető, ahol  $M_v$  a vortex köteghez kollektívan hozzárendelhető tömeg.

A modellben szereplő  $m_v$ , illetve  $M_v$  meghatározására két lehetőség kínálkozik:

1. Termodinamikai módszerrel a belső energiának a  $\mu_v$ -vortex kémiai potenciált [118] tartalmazó  $E_v$ -tagjából lehet nyerni, ugyanis  $E_v/\mu_v = M_v$ , illetve egyes vortexekre  $m_v$ .

2. A flux flow ellenállásra vonatkozó mikrohullámú kísérleti és elméleti vizsgálatok [46], [119] szintén adatokat szolgáltatnak a vortex tömegre nézve.

A flux creep jelenség a vizsgálati mintába bevezetett transzport áram miatt lép fel, amely az  $\Delta n_v = |n_v^0 - n_v|$  nemegyensúlyi inhomogenitást idéz elő a vortex eloszlásban. A külső áram megszűnése után az egyensúlyi, homogén vortex eloszlás igyekszik visszaállni. Termodinamikailag a folyamat két részből áll:

1. az egyensúly megzavarása,

2. majd a zavar exponenciális lecsengése, azaz a kiegyenlítődés, amelynek sebességét az  $\eta = \eta(T, H)$  nagysága határozza meg. Ha a transzport áramot a  $t=0$  időpillanatban szüntetjük meg, az egyensúly beállításának időbeli lefolyását az  $r$ -helyen a

$$d\Delta n_v(\mathbf{r}, t) = -\eta \Delta n_v(\mathbf{r}, t) dt \quad (5.7)$$

differenciál egyenlet jellemzi. Ha  $t=0$ -ban a  $\Delta n_v$  maximális, akkor  $(\Delta n_v)_{\max} = \Delta N_v(\mathbf{r})$  jelöléssel (5.7) megoldásaként a

$$\Delta n_v(\mathbf{r}, t) = \Delta N_v(\mathbf{r}) e^{-\eta t} \quad (5.8)$$

összefüggést kapjuk az egyensúlyi állapotba való visszatérés dinamizmusára. Ez egyben mérési utasítást is tartalmaz  $\eta$  kísérleti meghatározására vonatkozóan. Az így kapható mérési eredményt más tapasztalati, vagy elméleti  $\eta$ -értékekkel lehet összevetni, így például Kim *et al.* [71], vagy Kuprijanov *et al.* [79] már ismertetett formulájával.



A termodinamikai kiegyenlítődést lokálisan, a minta valamely  $\mathbf{r}$ -helyén elhelyezkedő egységnyi felületen vizsgálva, azt kell tapasztalnunk, hogy a vortex sűrűség és ezzel együtt a belső mágneses tér időbeli változása az

$$\frac{1}{c} \frac{d}{dt} n_v(\mathbf{r}, t) \Phi_0 = \frac{1}{c} \frac{dB(\mathbf{r}, t)}{dt} = -\text{rot } \epsilon \quad (5.9)$$

relációnak megfelelően, mérhető  $\epsilon = \epsilon(\mathbf{r}, t)$  elektromos teret indukál.

Ha a zavar folyamatos, azaz a külső  $j_Q$  konstans, akkor (5.7) helyett a

$$d n_v(\mathbf{r}, t) = \Delta n_v(\mathbf{r}, t) dt - \eta \Delta n_v(\mathbf{r}, t) dt \quad (5.10)$$

differenciál egyenlet írja le a tényleges állapotot. Ezt az jellemzi, hogy azonos időben két, egymással ellentétes folyamat zajlik le:

1. A külső áram a vortexeket a pinning centrumokhoz rögzített egyensúlyi helyzetükből elmozdítja,

2. a kötőerő hatása miatt a vortexek igyekeznek visszatérni egyensúlyi helyzetükbe. Az ily módon létrejövő nem-egyensúlyi vortex eloszlást az (5.10) egyenlet

$$\Delta n_v(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\eta} \Delta N_v (1 - e^{-\eta t}) \quad (5.11)$$

megoldása írja le, ami a  $t=0$ -ban a  $\Delta n_v=0$  határfeltételt kielégíti és a  $t=\infty$ -ben az egyensúlyi eloszlástól való eltérést adja meg.

Ha a transzport áram impulzusszerűen,  $t_1$  ideig folyik, kikapcsolása után  $t_2$  idővel

$$\Delta n_v(\mathbf{r}, t_1, t_2) = \frac{1}{\eta} \Delta N_v (1 - e^{-\eta t_1}) e^{-\eta t_2}. \quad (5.12)$$

Az esetben, amikor  $t_2=0$ , ez a formula az (5.11) összefüggésre vezet, viszont ha  $t_2 \rightarrow \infty$ , az egyensúly visszaállását szolgáltatja.

Mindaddig, amíg nincsen tökéletes kiegyenlítődés, a vortexek, illetve a vortex kötegek mozognak, és ennek makroszkopikus hatásaként fennáll a flux creep állapot.

### 3. A kritikus állapot több-komponensű modellje

Ez a modellünk a kis  $\kappa$ -jú anyagok flux-flow állapotának a méréseknél tapasztalt specifikumait írja le. A kritikus állapotnak olyan új értelmezését adja meg, ami megfelel a kísérleti tényeknek és ugyanakkor ezen túlmenő, kvantitatív információkat is szolgáltat.

Modellünk alapelve [120] az, hogy a különböző kritikus áramok és flux flow ellenállások fellépése azzal magyarázható meg, hogy a transzport áram hatásának kitett vortexek egyik része már rögzítetlen akkor, amikor a másik részük még rögzített.

A következőkben a számításunkat makroszkopikusan homogén mintákra vonatkoztatjuk. Továbbá, mivel a vortexek közötti effektív kölcsönhatási távolság éppen megegyezik a behatolási mélységgel, az ezen belül található vortexeket kötegeként kezeljük.



Ily módon, egy rögzítetlen vortex kötegre ható erő

$$\mathbf{F}_{\text{rögzítetlen}}^i = \sum_j^i \left( \frac{[\mathbf{j}_Q \times \Phi_0]}{c} - \sum_k \mathbf{F}_{klk}^{klj} - \sum_k \mathbf{F}_{kk}^{klj} \right), \quad (5.13)$$

ahol az első összegezés a kiválasztott  $i$ -dik vortex kötegre vonatkozik. A jobb oldal első tagja a  $j$ -dik vortexre ható Lorentz-erő, a második és harmadik tag pedig a kötetlen és a kötött vortexek részéről megnyilvánuló erőket jelenti. Figyelembe véve azt, hogy  $F_k^j = -F_j^k$  és a távoli vortexek kompenzálják egymást, a második tag eltűnik. Bevezetve az

$$\mathbf{F} = \frac{1}{n_{kl} n_k} \sum_j \sum_k \mathbf{F}_{kk}^{klj} \quad (5.14)$$

mennyiséget, ami egy kötött vortex részéről egy kötetlenre ható átlagos erőket jelenti, írhatjuk, hogy

$$\mathbf{F}_{\text{rögzítetlen}}^i = n_{kl}^i \left( \frac{[\mathbf{j}_Q \times \Phi_0]}{c} - n_k \mathbf{F} \right), \quad (5.15)$$

ahol  $n_k$  a kötött,  $n_{kl}$  a kötetlen vortex sűrűséget jelenti.

Hasonlóképpen, ha az összes pinning centrumok azonos pinning erővel hatnak, akkor az  $i$ -edik rögzített vortex kötegre ható erő

$$\mathbf{F}_{\text{rögzített}}^i = \sum_j^i \left( \frac{[\mathbf{j}_Q \times \Phi_0]}{c} - \sum_k \mathbf{F}_{klk}^{klj} - \sum_k \mathbf{F}_{kk}^{klj} - \mathbf{F}_P \right) \quad (5.16)$$

lesz, és mivel  $\sum_i \sum_k \mathbf{F}_{kk}^{klj} = 0$ , azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{F}_{\text{rögzített}}^i = n_k^i \left( \frac{[\mathbf{j}_Q \times \Phi_0]}{c} + n_{kl} \mathbf{F} - \mathbf{F}_P \right). \quad (5.17)$$

A kritikus állapotban a vortex kötegekre ható erők eredője zérus, ami kétféle módon valósulhat meg:

1. Ha  $F_{\text{rögzítetlen}} = 0$  és  $F_{\text{rögzített}} = 0$ , akkor a szereplő erők az (5.15) és (5.17) segítségével határozhatók meg:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{n_k} \frac{j_{Qc} \times \Phi_0}{c} \quad (5.18)$$

$$\mathbf{F}_P = \frac{n_k + n_{kl}}{n_k} \frac{j_{Qc} \times \Phi_0}{c}, \quad (5.19)$$

ahol

$$n_k + n_{kl} = n_v.$$

Ebben az esetben a kritikus áram, a mágneses tér és az anyagi jellemzők között az

$$\alpha_c = |\mathbf{j}_{Qc} \times \mathbf{B}| = c n_k |\mathbf{F}_P| \quad (5.20)$$

egyértelmű reláció érvényes.

2. Mivel a vortex-vortex kölcsönhatási  $F$ -erő értékére fennáll, hogy  $0 < F < F_{\max}$  megvalósítható az az eset, amikor  $F_{\text{rögzítetlen}} = 0$  és  $F_{\text{rögzített}} < 0$ , tehát a vortexeknek

csak a rögzítetlen része kezd mozogni. Ez az első kritikus áramnál áll elő, amelyet a

$$\frac{j_{QcI} \times \Phi_0}{c} n_k F_{\max} \quad (5.21)$$

összefüggés határoz meg.

Az áramsűrűség további növelésével elérjük azt az állapotot, amikor az összes vortex éppen mozogni kezd. A második kritikus áramot, amelynél ez bekövetkezik a

$$\frac{j_{QcII} \times \Phi_0}{c} = F_P - n_{kl} F_{\max} \quad (5.22)$$

egyenlet jellemzi.

Eszerint tehát két kritikus áram és két jellemző  $\alpha_c$ -paraméter létezik, amelyek

$$\alpha_{cI} = j_{QcI} B = c \frac{B}{\Phi_0} n_k F_{\max} \quad (5.23)$$

$$\alpha_{cII} = j_{QcII} B = c \frac{B}{\Phi_0} (F_P - n_{kl} F_{\max}). \quad (5.24)$$

Az ezeknek megfelelő flux flow ellenállások pedig a kísérleti (4.15) formulának megfelelően

$$\varrho_{vI} = \varrho_n \frac{H - n_k \Phi_0}{H_{c2}(T)} \quad (5.25)$$

$$\varrho_{vII} = \varrho_n \frac{H}{H_{c2}(T)}, \quad (5.26)$$

amiből látható, hogy a (4.15)-beli  $K$  mérési konstans értéke éppen  $K \sim n_k \Phi_0$ .

E megfontolások alapján meghatározható a kötött vortex sűrűség értéke, amelyre az adódik, hogy

$$n_k = \frac{1}{\varrho_n} [\varrho_{vII}(H) - \varrho_{vI}(H)] \frac{H_{c2}(T)}{\Phi_0}. \quad (5.27)$$

Hasonlóképpen az előbbi formulák segítségével kiszámítható a vortexek közötti maximális kölcsönhatási erő

$$F_{\max} = \frac{1}{c} \frac{\varrho_n}{\varrho_{vII} - \varrho_{vI}} \frac{j_{QcI}}{H_{c2}(T)} \Phi_0^2 \quad (5.28)$$

és mérhető mennyiségekkel vethető össze.

Általánosan, ha  $N$  különböző intenzitású pinning erő létezik, akkor ennek megfelelő számú kritikus áram és flux flow ellenállás lép fel.

Ily módon az előző 1. esethez hasonlóan most azt kapjuk, hogy

$$\alpha_c = j_{ci} B = c \sum_i F_{Pi} n_{ki}. \quad (5.29)$$



Ha viszont  $k > i$  esetén  $F_{Pk} > F_{Pi}$ , akkor az előbbi 2. esetnek megfelelően a vortexek csoportonként kerülnek kritikus állapotba. Tehát a korábbi (5.14) formula helyett az

$$F^{ik} = \frac{\sum_j^i \sum_l^k F_k^{klj}}{n_{kli} n_{kk}} \quad (5.30)$$

lesz érvényes, ami a még kötött  $k$ -dik vortex részéről a már kötetlen  $i$ -dik vortexre ható erőt fejezi ki.

E modellben a  $k$ -dik kritikus áramot a

$$\frac{j_{Qck} \times \Phi_0}{c} + \frac{\sum_{i < k} F^{ik}}{n_{kk}} = F_{Pk} \quad (5.31)$$

összefüggés, a  $k$ -dik flux flow ellenállást pedig a

$$Q_{vk} = Q_n \frac{H - \sum_{j=k}^N n_{kj} \Phi_0}{H_{c2}(T)} \quad (5.32)$$

reláció írja le.

Ezek az egyenletek tehát azt az esetet tartalmazzák, amikor  $N$  különböző pinningnek megfelelően  $N$  számú kritikus áram és fluxus áramlási ellenállás van jelen.

Az (5.27) formula lehetőséget ad a modell érvényességének egyszerű ellenőrzésére. Segítségével ugyanis  $n_k$  kiszámítható a benne szereplő mérhető adatok ismeretében.

Viszont, ha a minta egységnyi felületén helyet foglaló Bi atomok számát megbecsüljük, és feltesszük, hogy egy-egy pinning centrumot az egymástól  $\xi \sim \lambda \sim 1000 \text{ \AA}$ -nél nem távolabbi Bi atomok képeznek, ez egyszerű számítással egy új  $n_k$  értékre vezet. A két eredményt összehasonlítva, azokat azonos nagyságrendűnek találtuk. Ez az eljárás meglehetősen pontos, és így elfogadhatóan igazolja modellünk jogosságát és megbízhatóságát.

## VI. rész

# SZUPRAVEZETŐ MÁGNESES ÁLLAPOTOK TERMODINAMIKAI STABILITÁSA

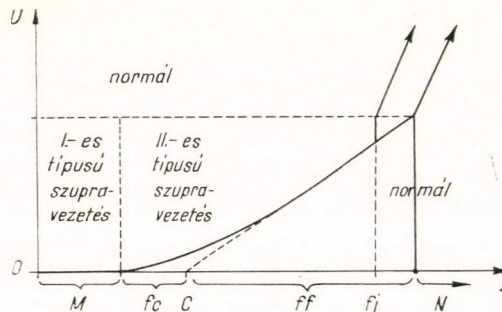
## 1. Bevezetés

A szupravezetési jelenségeknél általában három fajta kölcsönhatás lép fel: termikus, mágneses és elektromos. (A szokásos kísérleti feltételek mellett a mechanikai kölcsönhatás elhanyagolható.) Ezeket a 6.1 táblázatban szereplő extenzív, illetve intenzív paraméterekkel tudjuk jellemezni.

6.1 TÁBLÁZAT

Kölcsönhatás	Extenzív paraméter ( $x_i$ )	Intenzív paraméter ( $y_i$ )
Termikus	$S$ (entrópia)	$T$ (hőmérséklet)
Mágneses	$M$ (mágneses momentum)	$B$ (mágneses indukció)
Elektromos	$Q$ (töltés)	$U$ (potenciál)

Aktuális értékeik meghatározása szempontjából tekintjük át azokat a lehetséges szupravezetői állapotokat, amelyek egy általános szupravezetőnél külső mágneses tér jelenlétében, transzport áram hatására felléphetnek. A 6.1 ábrán az első szakasz



6.1 ábra

( $M$ ) az ideális diamágnesség Meissner-állapotát, a második tartomány ( $I_c$ ) a flux creep intervallumot,  $C$ -pont a kritikus állapotot,  $ff$  a flux flow tartományt,  $I_j$  a flux jump jelenséget,  $N$  pedig a normál állapotba való átmenetet jelenti.



## 2. A teljes entrópia sűrűség kiszámítása

Az a célunk, hogy meghatározzuk egy általános szupravezető fundamentális egyenletét [121], ahol a teljes entrópia sűrűség kifejezésében minden lehetséges kölcsönhatás egy-egy additív taggal szerepel.

A 6.1 táblázatban szereplő mágneses extenzív és intenzív paramétert  $H$  és  $\Phi_0$  segítségével kifejezve

$$S = \frac{1}{T} (E - \mathbf{B}\mathbf{M} - UQ) = \quad (6.1)$$

$$= \frac{1}{T} \left( E - \frac{B^2 - HB}{4\pi} - UQ \right), = \frac{1}{T} \left( E - \frac{n_v^2 \Phi_0^2 - n_v \mathbf{H}\Phi_0}{4\pi} - UQ \right),$$

ahol a zárójel első tagja a belső energia, második a mágneses energia tag (külön a vortexekre és a vortex-tér kölcsönhatásra), harmadik pedig az elektromos energiát adja meg.

Mikroszkopikus felfogásnak megfelelően viszont az  $E_{\text{total}}$  — teljes energia az  $E_{\text{kond}}$  — szupravezetési kondenzációs energiából, az  $E_{\text{tér}}$  — elektromágneses energiából és az  $E_{\text{kin}}$  — elektron kinetikus energiából

$$E_{\text{total}} = E_{\text{kond}} + E_{\text{tér}} + E_{\text{kin}} \quad (6.2)$$

tevődik össze, amelyekre lokálisan

$$E_{\text{kond}} = \frac{1}{8\pi} \int -h_c^2 dV$$

$$E_{\text{tér}} = \frac{1}{8\pi} \int (\epsilon^2 + h^2) dV \quad (6.3)$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \int N m v_e^2 dV = \frac{1}{8\pi} \int \lambda^2 (\text{rot } h)^2 dV,$$

ahol  $h$  a lokális mágneses,  $\epsilon$  a lokális elektromos tér,  $N$  az elektron eloszlási sűrűség.

Transzport elektromos áram nélküli esetben az  $\epsilon = 0$ . Viszont a mintán áramot vezetve át, két eset lehetséges:

1. Tiszta szupravezetés, amelynél  $h = h_v + h_Q$  mágneses térrel írható le az állapot, (ahol  $h_v$  a vortexek jelenléte miatti- és  $h_Q$  az elektromos áram által keltett térerősség).

2. Vortex gradiens és vortex mozgás fellépése, amelyet energia disszipáció kísér. Ekkor az egész mintára nézve

$$E_{\text{total}} = \frac{1}{8\pi} \int [-h_c^2 + \epsilon^2 + h^2 + \lambda^2 (\text{rot } h)^2] dV. \quad (6.4)$$

Ebből a  $h^2 + \lambda^2 (\text{rot } h)^2$  rész további kifejezése az alábbi módon történhet:

$$\begin{aligned} h^2 + \lambda^2 (\text{rot } h)^2 &= (h_v + h_Q)^2 + \lambda^2 [\text{rot } (h_v + h_Q)]^2 = \\ &= \underbrace{h_v^2 + \lambda^2 (\text{rot } h_v)^2}_{①} + \underbrace{h_Q^2 + \lambda^2 (\text{rot } h_Q)^2}_{②} + \underbrace{2h_v h_Q}_{③} + \underbrace{2\lambda^2 \text{rot } h_v \text{rot } h_Q}_{④}. \end{aligned}$$

Felhasználva [122] a

$$h_Q + \lambda^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} h_Q = 0$$

és

$$h_v + \lambda^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} h_v = \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

relációkat, (ahol  $\mathbf{r}_i$  az  $i$ -dik vortexre vonatkozik), továbbá a  $\Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  függvény értelmezésével kapcsolatban megjegyezve, hogy a vortexeket a szupravezetőben fellépő szingularitásokként (normál tartományokként) kezeljük, amelyekre a fluxus kvantálás ad mennyiségi értéket, az egyes tagok az alábbi alakra hozhatók:

$$\begin{aligned} \textcircled{1} &= h_v \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - h_v \lambda^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} h_v + \lambda^2 (\operatorname{rot} h_v)^2 = \\ &= \dots = \\ &= h_v \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \lambda^2 \operatorname{div} [h_v \times \operatorname{rot} h_v], \\ \textcircled{3} + \textcircled{4} &= h_v h_Q + h_Q h_v + \lambda^2 \operatorname{rot} h_v \operatorname{rot} h_Q + \\ &+ \lambda^2 \operatorname{rot} h_Q \operatorname{rot} h_v + h_Q [\Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - \lambda^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} h_v] - \\ &- \lambda^2 h_v \operatorname{rot} \operatorname{rot} h_Q + \lambda^2 h_v \operatorname{rot} h_v \operatorname{rot} h_Q + \\ &+ \lambda^2 \operatorname{rot} h_Q \operatorname{rot} h_v = \\ &= \dots = \\ &= h_Q \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \lambda^2 \operatorname{div} [h_Q \times \operatorname{rot} h_v] + \\ &+ \lambda^2 \operatorname{div} [h_v \times \operatorname{rot} h_Q]. \end{aligned}$$

Ekkor a teljes energia

$$\begin{aligned} E_{\text{total}} = \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \underbrace{-h_v^2}_{\textcircled{1}} + \underbrace{\xi^2}_{\textcircled{2}} + \underbrace{h_v \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}_{\textcircled{3}} + \underbrace{\lambda^2 \operatorname{div} [h_v \times \operatorname{rot} h_v]}_{\textcircled{4}} + \underbrace{h_Q^2 + \lambda^2 (\operatorname{rot} h_Q)^2}_{\textcircled{5}} + \right. \\ \left. + \underbrace{h_Q \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}_{\textcircled{6}} + \underbrace{\lambda^2 \operatorname{div} [h_Q \times \operatorname{rot} h_v]}_{\textcircled{7}} + \underbrace{\lambda^2 \operatorname{div} [h_v \times \operatorname{rot} h_Q]}_{\textcircled{8}} \right\} dV. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Itt az első tag a kondenzációs energia, a második az elektromos tér energiája, a harmadik és negyedik a vortex rendszer saját energiája, az ötödik a transzport áram energiája, a többiek pedig a vortex-elektromos áram kölcsönhatást jellemzik.

A ható erő meghatározása céljából alakítsuk át a (6.5) formulát. Az egyes tagok közül a

$$\textcircled{4} = \lambda^2 \int [h_v \times \operatorname{rot} h_v] df,$$

ahol a felületi integrálást a vortexek felületére vonatkoztatjuk, mivel a minta felületére vett integrál zérus. A koordináta rendszert úgy helyezve el, hogy a vortex szálak  $z$ -irányba mutassanak, és  $\xi$  sugarú, illetve egységnyi hosszúságú vortexeket feltételezve [54]

$$\lambda^2 2\pi \xi \int h_v(\xi) \operatorname{rot} h_v(\xi) dz = \lambda^2 2\pi \xi h_v(\xi) \frac{\Phi_0}{2\pi \lambda^2 \xi} = h_v(\xi) \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i),$$



amely a kiválasztott vortex saját energiája. Ehhez a többi vortex hatását hozzávéve (annak figyelembevételével, hogy a távolsággal az áram gyorsabban csökken, mint a térerősség):

$$\sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) \Phi_0 \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i).$$

Együttesen tehát

$$[4] = h_v(\xi) \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) \Phi_0 \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i)$$

$$[7] = h_Q \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

$$[8] = 0,$$

mivel szimmetria okokból mind a vortexre, mind a mintára vonatkozó felületi integrál eltűnik.

Mindezek alapján végül is a teljes energia az alábbi alakban határozható meg:

$$E_{\text{total}} = \frac{1}{8\pi} \int \left\{ -h_c^2 + \epsilon_Q^2 + h_Q^2 + \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \times \right. \\ \left. \times [h_v(0) + h_v(\xi) + \sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) + 2h_Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] + \lambda^2 (\text{rot } h_Q)^2 \right\} dV, \quad (6.6)$$

ahol az első tag a kondenzációs energia, a második az áram elektromos terének, a harmadik a mágneses terének energiája, a negyedik és az ötödik a vortexek saját energiája, a hatodik a vortex-vortex kölcsönhatás energiája, a hetedik a vortex-áram kölcsönhatási energia, a nyolcadik tag pedig a transzport elektronok mozgását jellemzi.

Ennek segítségével a vortex rendszer belső energiája

$$E_v = E_{\text{total}} - \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \epsilon_Q^2 + h_Q^2 + \lambda^2 (\text{rot } h_Q)^2 \right\} dV = \quad (6.7)$$

$$= \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \Phi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left[ h_v(0) + h_v(\xi) - \frac{\xi^2}{\Phi_0} h_c^2(\mathbf{r}) + \sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) + 2h_Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right] \right\} dV,$$

amiből a  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = n_v$  vortex sűrűség jelöléssel és az  $n_v \Phi_0 = B$  reláció lokális értelmezésével az energiasűrűséget kapjuk:

$$\varrho_{E_v} = \frac{1}{8\pi} n_v \Phi_0 \left[ 2h_v - \frac{\xi^2}{\Phi_0} h_c^2(\mathbf{r}) + \sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) + 2h_Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right] = n_v U_v, \quad (6.8)$$

ahol  $h_v$  az átlagos tér érték a vortexen belül, és  $U_v$  a vortex potenciál. A szupravezető minta belső energia sűrűsége a transzport áramot jellemző tagok és a termikus járulékok hozzáadásával kapható meg:

$$\varrho_E = T\varrho_s + \frac{1}{8\pi} [\epsilon_Q^2 + h_Q^2 + \lambda^2 (\text{rot } h_Q)^2 + U_v n_v] = \varrho_{E_{\text{term}}} + \varrho_{E_{\text{ei}}} + \varrho_{E_{\text{magn}}}. \quad (6.9)$$

Elektrodinamikai megfontolások alapján, mivel  $j_Q = n_Q ev_Q$

$$\epsilon_Q^2 + h_Q^2 = 4\pi U_e \varrho_Q + \frac{1}{c} A^2 + (\text{rot } A)^2 = 4\pi U_e \varrho_Q + \frac{4\pi}{c} j_Q A$$

és

$$\lambda^2 (\text{rot } h_Q)^2 = \frac{4\pi m \lambda^2}{e^2 n_Q} j_Q^2 = 4\pi \lambda^2 m n_Q v_Q^2,$$

amiknek a figyelembevétele a

$$\varrho_E = T \varrho_s + \frac{1}{2} (U_e \varrho_Q + \frac{1}{c} A n_Q ev_Q + \lambda^2 v_Q^2 m n_Q) + U_v n_v \quad (6.10)$$

energia-sűrűséget eredményezi. Ebből az entrópia-sűrűség a

$$\varrho_s = \frac{1}{T} \varrho_E - \frac{U_v}{T} n_v - \frac{U_Q}{T} \varrho_Q \quad (6.11)$$

formában adódik ki, ahol

$$U_v = \frac{1}{8\pi} \Phi_0 [2h_v - \frac{\xi^2}{\Phi_0} h_c^2(\mathbf{r}) + \sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) + 2h_Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] \quad (6.12)$$

és

$$U_Q = \frac{1}{2} (U_e + \frac{1}{c} A v_Q + \frac{\lambda^2 m}{e} v_Q^2). \quad (6.13)$$

Itt  $U_v$  a vortex-potenciál, amelynek első tagja a vortex-mágneses tér, második a kondenzációs tag, harmadik a vortex-vortex kölcsönhatást-, negyedik pedig az áram-vortex kölcsönhatást jellemző tag. Az  $U$ -teljes elektromos potenciál első tagja a transzport áram skaláris potenciálja, második a vektorpotenciál, harmadik pedig a kinetikus energiát jellemző rész.

A kapott általános összefüggés oly módon alkalmazható az egyes speciális szupravezető állapotokra, hogy mindig csak a nekik megfelelő tagokat kell figyelembe venni.

### 3. Stabilitás

Az egyensúlyi állapottól való eltérést a termodinamikai  $\alpha_i = \frac{x_i - (x_i)_0}{V}$  paraméterekkel írjuk le, ahol  $(x_i)_0$  az  $i$ -edik extenzív mennyiség egyensúlyi értéke. Ebben a skálában az entrópia  $\alpha$ -paramétere  $\alpha_s$  a többiek függvényeként állítható elő:

$$\alpha_s = \alpha_s(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \quad (6.14)$$

Az  $X_i$ -általános termodinamikai erők és az  $\alpha_i$ -paraméterek között az

$$X_i = \frac{\partial \alpha_s}{\partial \alpha_i} - \left( \frac{\partial \alpha_s}{\partial \alpha_i} \right)_0 = - \sum_k g_{ik} \alpha_k \quad (6.15)$$



reláció, az „áramok” és az erők között pedig az

$$\dot{\alpha}_i = j_i = \sum_k L_{ik} X_k \quad (6.16)$$

homogén lineáris kapcsolat áll fenn, amelyek révén a spontán folyamatokra vonatkozó, és mátrix írásmódban felírt termodinamikai mozgásegyenletek

$$\dot{\mathbf{X}} = -\hat{g}\hat{L}\mathbf{X} \quad (6.17)$$

és

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\hat{L}\hat{g}\boldsymbol{\alpha} \quad (6.18)$$

lesznek. A fellépő irreverzibilis entrópia változás, illetve entrópia produkció pedig a

$$\Delta\alpha_s = -\frac{1}{2} \sum_{i,k} g_{ik} \alpha_i \alpha_k = \frac{1}{2} \sum_i X_i \alpha_i \quad (6.19)$$

$$\sigma = \Delta\dot{\alpha}_s = -\sum_{i,k} g_{ik} \dot{\alpha}_i \alpha_k = \sum_i \dot{\alpha}_i X_i = \sum_{i,k} L_{ik} X_i X_k \quad (6.20)$$

alakban fogalmazható meg.

A termodinamikai stabilitás leírásában az  $n$ -edrendű, kvadratikus, szimmetrikus és pozitív — definit  $\hat{g} = \hat{g}[g_{ik}]$ -entrópia mátrix és  $\hat{L} = \hat{L}[L_{ik}]$ -vezetési mátrix alapvető szerepet játszik.

Tulajdonságait teljesen általánosan vizsgálva [123], az állapot  $\mathbf{r}$ -helyen történő időbeli változását a

$$-\frac{k}{f} \frac{\partial f}{\partial t} + k \operatorname{div}_e \left( \frac{1}{f} \nabla_e \hat{a} f \right) = -\frac{k}{f^2} (\nabla_e f, \nabla_e \hat{a} f) \quad (6.21)$$

kontinuitási egyenlettel írjuk le, ahol  $k$  egy konstans,  $f$  a  $q_1, q_2, \dots, q_n$  állapotterben értelmezett és egységre normált ( $\int f(q, t) d^n q = 1$ ) valószínűség sűrűség,  $\hat{a}$  pedig a diszperziós tenzor. Az  $\mathbf{r}$ -helyen és  $t$ -időben a makroszkopikus entrópia sűrűségét a  $\langle q_s \rangle$  várható érték adja meg:

$$\langle q_s(\mathbf{r}, t) \rangle = -k \int f \ln f d^n q, \quad (6.22)$$

és ennek  $\langle q_i \rangle$  és  $\langle q_k \rangle$ -szerinti vegyes második deriváltja szolgáltatja a  $\hat{g}$  mátrix elemeit. Ebből következik, hogy  $\hat{g}$  pozitív definit jellege a (6.22) egyenlet következménye. Az integrál értéke akkor maximális, amikor  $f = f(q)$  állandó, illetve amikor leginkább lapos. A mellékfeltételek miatt gyakorlatilag csak ez utóbbi valósulhat meg.

(6.21)-ből látszik, hogy az  $L_{ik}$  vezetési mátrix az  $a_{ik}$  szórástenzornak felel meg és emiatt pozitív definit. Az  $a_{ii} = 0 \leftrightarrow L_{ii} = 0$  szemidefinit karakter olyan esetnek felel meg, amikor a  $q$  szerinti eloszlás pontszerű és az állapot determinisztikus. (Csak egyetlen állapot létezhet egyetlen valószínűséggel, ami azonban gyakorlatilag nem valósul meg.) Nagyon éles, de nem pontszerű eloszlásnál  $a_{ii}$  és így  $L_{ii}$  nagyon kicsi értékkel rendelkezik.

Az  $a_{ik} \leftrightarrow L_{ik}$  vegyes indexű elemek  $i \neq k$  esetén  $q_i$  és  $q_k$  valószínűségi függését mérik. Emiatt, ha  $q_i$  és  $q_k$  független valószínűségi változók, akkor  $a_{ik} = 0 \leftrightarrow L_{ik} = 0$  és így  $L$  diagonális, és kereszt-effektusok nem jönnek létre.

Az előbbi egyenletek alapján az entrópia-mátrix elemei kiszámíthatók:

$$g_{11} = -\frac{\partial^2 Q_s}{\partial Q_E^2} = -\frac{\partial \left( \frac{1}{T} \right)}{\partial Q_E} = \frac{1}{T^2} \frac{1}{C} = g_E \quad (6.23)$$

$$g_{12} = -\frac{\partial^2 Q_s}{\partial Q_E \partial n_v} = \frac{\Phi_0}{4\pi T^2} \frac{\partial T}{\partial M} = \dots = \frac{1}{T^2} \left[ T \frac{\partial U_v}{\partial Q_E} - U_v \frac{\partial T}{\partial Q_E} \right] = g_{21} \quad (6.24)$$

$$g_{13} = -\frac{\partial^2 Q_s}{\partial Q_E \partial Q_Q} = \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial Q_Q} = \dots = \frac{1}{T^2} \left[ T \frac{\partial U_Q}{\partial Q_E} - U_Q \frac{\partial T}{\partial Q_E} \right] = g_{31} \quad (6.25)$$

$$g_{22} = -\frac{\partial^2 Q_s}{\partial n_v^2} = \frac{1}{T^2} \left[ T \frac{\partial U_v}{\partial n_v} - U_v \frac{\partial T}{\partial n_v} \right] = g_v \quad (6.26)$$

$$g_{23} = -\frac{\partial^2 Q_s}{\partial n_v \partial Q_Q} = \frac{1}{T^2} \left[ T \frac{\partial U_v}{\partial Q_Q} - U_v \frac{\partial T}{\partial Q_Q} \right] = \dots = \frac{1}{T^2} \left[ T \frac{\partial U_Q}{\partial n_v} - U_Q \frac{\partial T}{\partial n_v} \right] = g_{32} \quad (6.27)$$

$$g_{33} = -\frac{\partial^2 Q_s}{\partial Q_Q^2} = \frac{1}{T^2} \left[ T \frac{\partial U_Q}{\partial Q_Q} - U_Q \frac{\partial T}{\partial Q_Q} \right] = g_Q \quad (6.28)$$

Az  $\hat{L}$  mátrix elemeinek meghatározásához különböző empirikus adatok ismerete szükséges. Vizsgáljuk ezek hatását a 6.1 ábrán jelzett egyes, konkrét állapotokra.

Önmagukban az  $\hat{L}$  mátrix elemei a termodinamikai állapot instabilitását, például fázisátmenetet nem képesek kiváltani. Ennek oka az, hogy a diszperziós tenzor semmilyen körülmények között nem válhat indefinitté. Ha  $g_{ii} \rightarrow 0$ , a stabilitás megőrzése  $L_{ii}$ -nek a megfelelő rendben  $\infty$ -hez való tartását követeli meg. Viszont, bizonyos esetekben, amikor  $L_{ii} = \infty$ , ez egyedül végső soron csak neutrális egyensúlyt okozhat. Az instabilis állapot létrejöttéhez a  $\hat{g}$  és az  $\hat{L}$  mátrix megfelelő elemének együttes és hirtelen megváltozása szükséges.

### 3.1 Normál állapot

Teljesség kedvéért induljunk ki a normál állapotból. (6.1)-nek megfelelően a jellemző extenzív paraméterek  $E$ ,  $M$ ,  $Q$ , az intenzívek  $\frac{1}{T}$ ,  $-\frac{H}{T}$ ,  $-\frac{U}{T}$  lesznek.

Ennek alapján a  $\hat{g}$  mátrix  $3 \times 3$ -asnak, és hasonlóan az  $\hat{L}$  mátrix is  $3 \times 3$ -asnak adódik, ahol  $L_{11} = L_E$  a hővezetési,  $L_{33} = L_Q$  az elektromos vezetési koefficiens, az  $L_{12} = L_{21}$  a termo-mágneses,  $L_{13} = L_{31}$  a termo-elektromos és  $L_{23} = L_{32}$  a galvano-mágneses kölcsönhatásokat jellemzi.

### 3.2 Szupravezetés

Ha  $T \rightarrow T_c$ , a normál állapot másodrendű fázisátalakulással Meissner-állapotba megy át. Jellemző extenzívek:  $E$ ,  $M$ ,  $Q$ , intenzívek:  $\frac{1}{T}$ ,  $-\frac{U_v}{T}$ ,  $-\frac{U_Q}{T}$ . Ezt a  $\hat{g}$  és  $\hat{L}$ -mátrix viselkedése úgy tükrözi, hogy ugrásszerűen változik meg.



Mivel  $M$  a szupraáramból származik, kétféle tárgyalásmód lehetséges. A fenti extenzívek közül  $E$ -t és  $M$ -et választva ki, a mágneses jellemzők,  $E$ -t és  $Q$ -t választva, pedig az elektromos jellemzők adódnak ki. A (6.12) alatt szereplő  $U_v$ -mágneses potenciálból most mindössze a szupraáram mágneses tere van jelen.

a) Energetikai és mágneses állapot változásnál

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{T^2 C_s} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4\pi T} \end{bmatrix} \quad (6.29)$$

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_E & L_{12} \\ L_{21} & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.30)$$

ahol  $L_{12} = L_{21}$  a termomágneses kölcsönhatások lehetőségére [124] utal, és  $C_s$  a specifikus hő. Ekkor

$$\dot{\alpha}_E = j_E \Delta \dot{Q}_E = L_{11} \nabla \frac{1}{T} + L_{12} \nabla \frac{B}{T} = 0 \quad (6.31)$$

$$\dot{\alpha}_M = j_M = \Delta \dot{Q}_M = L_{21} \nabla \frac{1}{T} = 0, \quad (6.32)$$

mivel az anyagmintában  $T = \text{konst}$ , és  $B = 0$ . Ezen egyenletek fizikai értelme az, hogy Meissner-állapotban sem az energia, sem a mágnesezés nem transzportálódik. Így módon az entrópia produkció

$$\Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = \sum_{i=1}^2 \dot{\alpha}_i X_i = \dot{\alpha}_E X_E + \dot{\alpha}_M X_M = 0, \quad (6.33)$$

ami megegyezik az ismert tapasztalati tényekkel.

b) Energetikai és elektromos állapotváltozásnál

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{13} \\ g_{31} & g_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{T^2 C_s} & \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial N_{\text{sup}}} \\ \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial N_{\text{sup}}} & 0 \end{bmatrix} \quad (6.34)$$

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{13} \\ L_{31} & L_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_E & L_{13} \\ L_{31} & L_Q \end{bmatrix}, \quad (6.35)$$

az áramok pedig

$$j_E = \dot{\alpha}_E = L_E \nabla \frac{1}{T} + L_{13} \nabla \frac{U_Q}{T} = 0 \quad (6.36)$$

$$j_Q = \dot{\alpha}_Q = L_{31} \nabla \frac{1}{T} + L_Q \nabla \frac{U_Q}{T}, \quad (6.37)$$

ahonnan  $T = \text{konstans}$  miatt

$$j_Q = \dot{\alpha}_Q = L_Q \nabla \frac{U_Q}{T} = \frac{1}{T} L_Q X_Q = j_{\text{sup}}, \quad (6.38)$$

ahol  $j_{\text{sup}}$  a szupraáram sűrűsége. Mivel  $L_Q = \infty$ ,  $X_Q = 0$  lesz. Ebből következik, hogy

$$\epsilon = 0 \quad (6.39)$$

és

$$A + \lambda^2 j_{\text{sup}} = 0, \quad (6.40)$$

ami megfelel a London-egyenleteknek.

Az ezen kölcsönhatásokból származó entrópia-produkció a  $j_E = 0$  és az  $X_Q = 0$  miatt

$$\Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = j_E X_E + j_Q X_Q = 0, \quad (6.41)$$

ahogyan azt a tapasztalat is mutatja.

A szupravezetőre külső elektromos áramot adva,  $j_Q < j_{Qc}$  esetén fentmarad a Meissner-állapot. Viszont  $j_Q = j_{Qc}$ -nél a mágneses tér lokálisan eléri a  $H = H_c$  értéket, és normál tartományok jelennek meg. Következésképpen mind a  $\hat{g}$ -mátrix, mind az  $\hat{L}$ -mátrix elemei megváltoznak.

Ha a normál tartományok makroszkopikusak, akkor I. rendű szupravezetés van. Ilyenkor disszipáció jelenik meg, ami  $\hat{g}$ -ben tükröződik, mert a (6.29)-beli

$$g_{22} \neq -\frac{1}{4\pi T} \quad (6.42)$$

és természetesen ilyenkor

$$j_M = \dot{\alpha}_M = \text{véges}. \quad (6.43)$$

Elektromos reprezentációban tárgyalva viszont

$$L_{33} = L_Q \neq \infty, \quad (6.44)$$

hanem az anyagra jellemző  $L_Q = f(j_Q, j_{Qc}, T)$  értéket vesz fel. A vizsgálati minta már nem tekinthető homogénnek, az anyag szupravezető és normál rétegekre hasad szét.

### 3.3 Vortex állapot

Amikor a normál tartományok mikroszkopikusak, II. rendű szupravezetés van. Ilyenkor, egyensúlyi állapotban a rendszer termodinamikailag homogénnek tekinthető.

A vortex fogalom segítségével a jelenségeket mágneses reprezentációban is leírhatjuk. Ilyen esetben a disszipációért a normál elektronok (vortexek) a felelősek.

(6.11)-nek megfelelően tehát háromfajta (energetikai, mágneses és szupravezető-elektromos) kölcsönhatást tekintünk [125]. Ilyenkor a teljes  $\hat{g}$  mátrix elemei érvényesek. Az  $\hat{L}$  mátrix elemeiről az alábbi megfontolások szolgáltatnak információt:

$$\begin{aligned} j_E &= \dot{\alpha}_E = L_{11} X_E + L_{12} X_v + L_{13} X_Q \\ j_v &= \dot{\alpha}_v = L_{21} X_E + L_{22} X_v + L_{23} X_Q \\ j_Q &= \dot{\alpha}_Q = L_{31} X_E + L_{32} X_v + L_{33} X_Q, \end{aligned} \quad (6.45)$$



ahonnan

$$\begin{aligned}
 X_Q &= -\frac{L_{31}}{L_{33}} X_E - \frac{L_{32}}{L_{33}} X_v + \frac{1}{L_{33}} j_Q \\
 j_E &= \left( L_{11} - \frac{L_{13} L_{31}}{L_{33}} \right) X_E + \left( L_{12} - \frac{L_{13} L_{32}}{L_{33}} \right) X_v + \frac{L_{13}}{L_{33}} j_Q \\
 j_v &= \left( L_{21} - \frac{L_{23} L_{31}}{L_{33}} \right) X_E + \left( L_{22} - \frac{L_{23} L_{32}}{L_{33}} \right) X_v + \frac{L_{23}}{L_{33}} j_Q
 \end{aligned} \quad (6.46)$$

és mivel  $L_{33} = L_Q = \infty$ , azért

$$X_Q = \frac{1}{2} \nabla \frac{1}{T} \left( U_e + \frac{1}{c} (\mathbf{A}, \mathbf{v}_Q) + \frac{\lambda^2 m}{e} v_Q^2 \right). \quad (6.47)$$

Ez az egyenlet határozza meg transzport elektronok eloszlását a szupravezető min-tában. E relációval tehát a szupravezető elektronok állapotát meghatároztuk. Így a további tárgyalásban két rendszerünk marad és a (6.46) vezetési egyenletek a

$$\begin{aligned}
 j_E &= \dot{\alpha}_E = L_{11} X_E + L_{12} X_v \\
 j_v &= \dot{\alpha}_v = L_{21} X_E + L_{22} X_v
 \end{aligned} \quad (6.48)$$

lineáris egyenletekbe mennek át, ami az energetikai és a vortex kölcsönhatások figyelembevételének kielégítő voltát illusztrálja.

(Természetesen jelen esetben is lehetőség van arra, hogy az energia és az elektro-nok reprezentációjában vizsgáljuk a kérdést, azonban ez a tárgyalásmód jóval nehéz-kesebb lenne [118], mint az általunk követett.)

A (6.48)-nak megfelelő entrópia-produkció

$$\Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = j_E X_E + j_v X_v \quad (6.49)$$

lesz, amely még homogén hőmérséklet eloszlás mellett is véges értékű.

A tárgyalat reprezentációhoz tartozó  $\hat{g}$ -mátrix elemei az alábbi formában írhatók fel és részben mérési adatok, részben elméleti becslések útján határozhatók meg:

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{T^2 C_s} & \frac{\Phi_0}{T^2} \frac{\partial T}{\partial B} \\ \frac{\Phi_0}{T^2} \frac{\partial T}{\partial B} & \frac{1}{8\pi T} \Phi_0 \frac{\partial h_v^{\text{eff}}}{\partial n_v} \end{bmatrix}, \quad (6.50)$$

ahol  $h_v^{\text{eff}}$  a (6.12) első és harmadik tagjából adódik.

(6.12)-ből látható, hogy homogén hőmérséklet eloszlás mellett a mágneses kölcsönhatási erő két részből fog állni:

$$X_v = \nabla \frac{U_v}{T} = X_{vv} + X_{Qv} \quad (6.51)$$

oly módon, hogy  $X_{vv}$  a vortexeket,  $X_{Qv}$  pedig a transzport áramot jellemzi.

$$X_{vv} = \frac{1}{8\pi T} \nabla \left[ \Phi_0 (2\mathbf{h}_v - \frac{\xi^2}{\Phi_0^2} \Phi_0 h_c^2(\mathbf{r}) + \sum_k \mathbf{h}_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i)) \right], \quad (6.52)$$

ahol az első tag gradiense zérus, a második függ az anyag szerkezetétől (pinning), és mivel a harmadik tag a vortex-vortex egymásra hatást írja le, makroszkopikusan homogén vortex eloszlás esetén ez is zérus.

$$X_{Qv} = \frac{1}{4\pi T} \nabla (\Phi_0, \mathbf{h}_Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)) = \frac{1}{4\pi T} \{ [\Phi_0 \times \text{rot } \mathbf{h}_Q] + (\Phi_0, \nabla) \mathbf{h}_Q \} = \frac{1}{cT} [\mathbf{j}_Q \times \Phi_0], \quad (6.53)$$

mivel  $\Phi_0$  és  $h_Q$  párhuzamosak. A kapott reláció tehát éppen a transzport áram hatására fellépő Lorentz-erőt adja.

A vortexek mozgása során a transzport áram változását elhanyagolhatjuk, ezért  $X_{Qv}$  konstansnak tekinthető.

### 3.4 Flux flow

Ha a vortexekre ható eredő erő nem zérus, flux flow mozgás lép fel, amely disszipatív.

$X_{vv}=0$  esetén  $X_v = X_{Qv}$ , ekkor a vortex áramsűrűség

$$\mathbf{j}_v = \alpha_v = L_{21} X_E + L_{22} X_v,$$

ami  $T = \text{const}$  értéket feltételezve

$$\mathbf{j}_v = L_v X_{Qv} = \frac{1}{cT} L_v [\mathbf{j}_Q \times \Phi_0] \quad (6.54)$$

kifejezésbe megy át, amelyből a fluxus mozgás  $L_{22} = L_v$ -vezetési koefficiense meghatározható. Összevetve ugyanis (6.54)-el a súrlódásos konvektív vortex áramlás általános

$$\mathbf{j}_v = n_v \Phi_0 \mathbf{v}_v$$

$$\eta \mathbf{v}_v = \frac{1}{c} [\mathbf{j}_Q \times \Phi_0]$$

kifejezéseit,

$$L_v = T \frac{n_v \Phi_0}{\eta} \quad (6.55)$$

adódik.

A fluxus áram miatt fellépő entrópia produkció jelen esetben:

$$\Delta \dot{z}_s = \sigma = j_v X_{Qv} = \frac{1}{T} \eta v_v^2 n_v \Phi_0, \quad (6.56)$$

amiből a disszipációra

$$D = T \sigma = \eta v_v^2 n_v \Phi_0 \quad (6.57)$$

kifejezés adódik.



### 3.5 Flux creep

A stacioner állapotok stabilitását általánosan, egy olyan variációs elv segítségével [126] vizsgáltuk meg, ahol az  $\mathcal{L}$ -Lagrange-függvényben az  $r_1, r_2, r_3$  helykoordináták, a  $t$ -idő, az  $y_1, y_2, \dots, y_n$  intenzív paraméterek és azok  $\nabla y_1, \nabla y_2, \dots, \nabla y_n$  gradiensei szerepelnek független változóként:

$$\int_t \int_V \mathcal{L}(r_1, r_2, r_3, t; y_1, y_2, \dots, y_n; \nabla y_1, \nabla y_2, \dots, \nabla y_n) dr_1 dr_2 dr_3 dt = \text{extr.} \quad (6.58)$$

A  $\partial y_i / \partial r_k = y_i^{(r_k)}$ ,  $k = 1, 2, 3$ , jelöléssel a variációs probléma Euler—Lagrange-egyenletei

$$\frac{\partial}{\partial r_1} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i^{(r_1)}} + \frac{\partial}{\partial r_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i^{(r_2)}} + \frac{\partial}{\partial r_3} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i^{(r_3)}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i} = 0 \quad (6.59)$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

lesznek, amelyeket a megfelelő stacionárius termodinamikai Lagrange-függvényre alkalmazva, az entrópia

$$\text{div } j_s = \sum_{i=1}^n (\nabla y_i, j_i) + \sum_{i=1}^n y_i q_i \quad (6.60)$$

teljes stacioner mérleg egyenletét nyerjük, amelyben a spontán entrópia produkció mellett az extenzív mennyiségek  $q_i$ -forrásaiból származó tagok is megjelennek.

A szükséges számítások elvégzése az

$$\int \mathcal{L}(\dots) d^3 r dt = \min \quad (6.61)$$

összefüggésre vezet, amely éppen a stabilitás feltétele.

Ezen elvi megfontolások alapján, az  $R$ -rendszer stabilis stacionárius állapotát az  $R^1, R, R^2$  három-test kölcsönhatásnak megfelelő modellel írjuk le. Ilyenkor ugyanis  $R$  stacionaritása feltétlenül biztosítható, mert az

$$I_i^2 = I_i^{R \rightarrow R^2}$$

áram mindig fedezhető az

$$I_i^1 = I_i^{R^1 \rightarrow R} - \text{áram és a } Q_i - \text{belső forrás}$$

segítségével, amely az  $R$ -rendszerben lép fel. Általánosságban ez az elrendezés képezi a stacionaritás legegyszerűbb modelljét, amelynél az  $\dot{\alpha}_i$  áram a (6.16) egyenlet módosításával kapható:

$$\dot{\alpha}_i = I_i^1 - I_i^2 + Q_i = \dot{\alpha}_i^1 - \dot{\alpha}_i^2 + Q_i. \quad (6.62)$$

Az itt levő mennyiségek közül célszerűen az  $I_i^2$ -t tekintve külső hatás következményének, vagy „külső forrás”-nak,  $I_i^2 = \sum_k L_{ik}^2 X_k^2 = F_i(t)$  jelöléssel

$$\dot{\alpha}_i = \sum_k L_{ik}^1 X_k^1 - F_i(t) + Q_i(t), \quad (6.63)$$

aminek a segítségével a teljes stacionaritás mozgásegyenletei (mátrix írásmódban):

$$\dot{X} = -gLX + gF(t) - gQ(t) \quad (6.64)$$

$$\dot{\alpha} = -Lg\alpha - F(t) + Q(t) \quad (6.65)$$

lesznek.  $F(t) = F_0 = \text{const}$  és  $Q(t) = Q_0 = \text{const}$  feltétellel ezek megoldásai az

$$X(t) = (-L^{-1}F_0 + L^{-1}Q_0 + X_{\text{kezd}})e^{-gLt} + L^{-1}F_0 - L^{-1}Q_0 \quad (6.66)$$

$$\alpha(t) = (g^{-1}L^{-1}F_0 - g^{-1}L^{-1}Q_0 + \alpha_{\text{kezd}})e^{-Lgt} - g^{-1}L^{-1}F_0 + g^{-1}L^{-1}Q_0 \quad (6.67)$$

alakban állíthatók elő.

Ha  $X_{vv} \neq 0$ , akkor ez azt jelenti, hogy a vortexeket rögzítő pinningek létezésével számolunk. Ismét  $T = \text{const}$  eloszlást feltételezve

$$\dot{\alpha}_v = j_v = L_v X_{vv} + L_v X_{Qv}, \quad (6.68)$$

ami

$$X_{vv} = -g_v \alpha_v$$

és (6.53) segítségével

$$\dot{\alpha}_v = j_v = -L_v g_v \alpha_v + \frac{1}{cT} L_v j_Q \Phi_0 \quad (6.69)$$

alakúra hozható. Az állapot stabilitása szempontjából (6.69) jobb oldalának második tagja olyan  $F_v(t)$ -külső forrásnak tekinthető, amelynek az a feladata, hogy a nem-egyensúlyi eltérést stabilisan fenntartsa. A nem-egyensúlyi vortex eloszlás fenntartásának stabilizációs mechanizmusa tehát nem más, mint az anyagmintába kívülről bevezetett elektromos áramnak a vortexekre gyakorolt hatása. Ezzel a megfogalmazással a ható erő differenciál egyenlete is előállítható, és (6.69)-el együtt a nem-egyensúlyi stacionárius állapot mozgásegyenleteit szolgáltatja:

$$\dot{X}_v(t) = -g_v L_v X_{vv}(t) + g_v F_v(t) \quad (6.70)$$

$$\dot{\alpha}_v(t) = -L_v g_v \alpha_v(t) + F_v(t). \quad (6.71)$$

A  $j_Q$ -transzport áram és ezzel együtt az  $X_{Qv}$ -termodinamikai erő változásának elhanyagolása  $F_v(t) = F_0 = \text{konstans}$  jellegét vonja maga után. Ennek, és  $\alpha_{v\text{kezd}} = 0$ , illetve  $X_{v\text{kezd}} = 0$  értéknek figyelembevételével a (6.70) és (6.71) egyenlet megoldása

$$X_v(t) = -L_v^{-1}F_0 + L_v^{-1}F_0 e^{-g_v L_v t} \quad (6.72)$$

$$\alpha_v(t) = g_v^{-1}L_v^{-1}F_0 - g_v^{-1}L_v^{-1}F_0 e^{-L_v g_v t} \quad (6.73)$$

amik, amint látható, egy-egy időben konstans és egy-egy időben exponenciálisan lecsengő tagot tartalmaznak. Ezek azt fejezik ki, hogy  $g_v L_v = \frac{n_v \Phi_0}{\eta} \frac{\partial U_v}{\partial n_v} = \frac{1}{8\pi} \frac{n_v}{\eta} \Phi_0^2 \frac{\partial h_v^{\text{eff}}}{\partial n_v} > 0$  esetén, elegendően hosszú idő elteltével beáll egy nem-egyensúlyi stacioner alapszint:

$$X_v(t = \infty) = -L_v^{-1}F_0 \quad (6.74)$$

$$\alpha_v(t = \infty) = g_v^{-1}L_v^{-1}F_0, \quad (6.75)$$



amelynek nagyságát éppen a (6.74) és (6.75) egyenletek határozzák meg. Az ehhez szükséges  $F_0$  értéket viszont (6.54)-nek és (6.55)-nek (6.70)-el való összevetése szolgáltatja:

$$F_0 = \frac{1}{c} \frac{B j_Q \Phi_0}{\eta}, \quad (6.76)$$

ami egyben azt is megmutatja, hogy hogyan kell a kezdettől fogva stabilis stacionaritást biztosító külső forrást megválasztani.

### 3.6 Flux flow pinning jelenlétében

Tételezzük fel, hogy a hőmérséklet eloszlás homogén és a külső mágneses tér időben konstans, azaz a vortexeknek nincsen forrása az anyagban.

Pinning és külső áram egyidejű létezésekor a vortex eloszlásban inhomogenitás lép fel. A vortex gradiens akkor lesz maximális, amikor az  $X_{Qv}$  mozgató erő meg egyezik a rögzítő erő és a vortexek közötti kölcsönhatási erő  $X_{vv}$ -eredőjével. Ez éppen a *kritikus* állapot. Az ehhez tartozó maximális nem-egyensúlyi eltérés  $\alpha_{v \max} = \alpha_{vc}$ , amit a vortex áramlás szempontjából kezdeti  $\alpha_v$ -skálaértéknek veszünk. Az  $\alpha_v$  csak  $B$ -től és a minta anyagi minőségétől függ.

Ha viszont  $X_{Qv} > X_{vv}$ , akkor a vortex áram

$$\dot{\alpha}_v(t) = L_v X_{vv} + L_v X_{Qv} = -L_v g_v \alpha_v + L_v X_{Qv}. \quad (6.77)$$

Ennek az egyenletnek a megoldására nézve az a megszorítás igaz, hogy stacioner állapotban

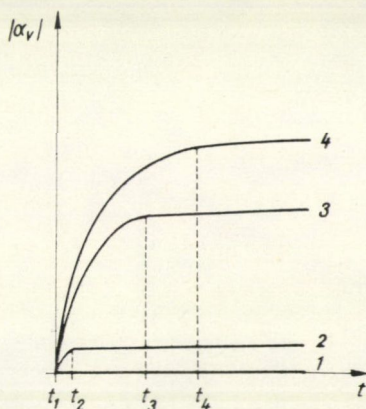
$$\alpha_v(t) \leq \alpha_{vc}, \quad (6.78)$$

amely éppen a  $t_c$  időpontban áll elő. Ennek figyelembevételével  $X_{Qv} = \text{konstans}$  és ezzel együtt  $F_v(t) = L_v X_{Qv} = F_0 = \text{konstans}$  esetén

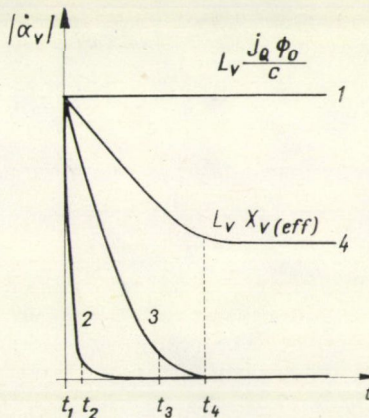
$$0 < t < t_c\text{-nél:} \quad \alpha_v(t) = g_{22}^{-1} X_{Qv} (1 - e^{-L_v g_v t}) \quad (6.79)$$

$$t = t_c\text{-nél:} \quad \alpha_v(t_c) = \alpha_{v \max} = \alpha_{vc} \quad (6.80)$$

$$\text{és } t > t_c\text{-nél:} \quad \dot{\alpha}_v(t) = L_v [X_{Qv} - g_v \alpha_{vc}] = L_v X_{v(\text{eff})}, \quad (6.81)$$



6.2 ábra



6.3 ábra

amely  $X_{Qv} = \text{konstans}$  esetén szintén állandó nagyságú, ahol  $X_{v(\text{eff})}$  a vortexekre ható tényleges mozgató erőt jelenti. Eszerint (6.81) olyan általános flux flow egyenletnek tekinthető, amikor a külső forrásból származó dinamikus erő mellett a pinning erők is résztvesznek a fluxus áramlás kialakításában [127].

Ezen egyenletek fizikai tartalmát kereszteffektus mentes esetben a 6.2 és 6.3 ábra szemlélteti. A két ábrán az azonos számjelű görbék tartoznak össze.

Az 1. görbék a pinning mentes esetnek, a 2. az azonos intenzitással pinningelt vortexeknek, a 3. görbék az  $\alpha_v < \alpha_{vc}$  esetnek felelnek meg, amikor már vannak mozgó (nem rögzített) vortexek is, a 4. az  $X_{Qv} > X_{vv}$  állapotot reprezentálja, amikor mind egyik vortex mozog.

A stabilizálási mechanizmust jelen esetben az jelenti, hogy ha előírt

$$\dot{\alpha}_v = \dot{\alpha}_v(t = t_c) = \text{Konst} \quad (6.82)$$

vortex áramot szeretnénk elérni és stabilisan fenntartani, ehhez az

$$\mathbf{F}_v(t) = \frac{1}{cT} L_v [\mathbf{j}_Q \times \Phi_0] \quad (6.83)$$

külső forrás szerepét játszó töltésáramot, és ezzel együtt az  $X_{Qv}$ -erőt úgy kell megválasztani, hogy a (6.77) egyenlet jobb oldalán szereplő különbség éppen (6.82)-t adjon.

A flux flow állapothoz rendelhető entrópia-produkció (6.81) segítségével kapható meg:

$$\Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = L_v (X_{Qv} - g_v \alpha_{vc}) X_{v(\text{eff})} > 0, \quad (6.84)$$

ami a vortexek mozgás közbeni energia szállításából adódik.

A vortex mozgást kísérő elektromos térerősség

$$\epsilon = \frac{1}{c} \|\mathbf{v}_v \times \mathbf{B}\| \frac{1}{c} L_v (X_{Qv} - g_v \alpha_{vc}), \quad (6.85)$$

és ennek alapján a flux flow ellenállás

$$\varrho_v = \frac{d\epsilon}{dj_Q} = \frac{1}{c} L_v \frac{dX_{v(\text{eff})}}{dj_Q} = \frac{1}{c^2 T} L_v \Phi_0 = \frac{1}{c^2} \frac{n_v}{\eta} \Phi_0^2, \quad (6.86)$$

amik a tapasztalattal egyezésben vannak.

### 3.7 Flux jump

A flux jump a mintában lokális inhomogenitás hatására előálló lokális instabilitást jelent. A zavar a vortex áramsűrűség hirtelen megváltozásából áll, amely adott helyen háromféleképpen jöhet létre: gyors változás az energia sűrűségben, vagy a vortex sűrűségben, illetve a vortex sebességben. Ezek oka vagy a hőmérséklet-, vagy a külső mágneses tér-, illetve a transzport áram hirtelen megnövekedése. Természetesen ezek kereszteffektusai is szerephez jutnak.



Abban az esetben, ha a létrejövő inhomogenitás olyan nagy, hogy a minta valamely helyén

$$T \rightarrow T_c$$

vagy

$$H \rightarrow H_{c2},$$

akkor ez lavinaszerű fluxus behatoláshoz vezet, ami a megadott helyen normál állapotba viheti át az anyagot.

Előfordulhat olyan eset is, amikor a primér zavar önmagában még nem hozná létre a flux jump állapotot, azonban az általa gerjesztett kereszt-effektusok már lokális átmenetet okoznak. Ennek vizsgálatához a termodinamikai mozgásegyenletek általános felírása szükséges. A termikus inhomogenitást hőmérséklet gradiensként, a külső tér megnövekedését pedig vortex forrásként vesszük figyelembe:

$$\dot{\alpha}_E(t) = -(L_E g_{11} + L_{12} g_{21}) \alpha_E(t) - (L_E g_{12} + L_{12} g_{22}) \alpha_v(t) \quad (6.87)$$

$$\dot{\alpha}_v(t) = -(L_{21} g_{11} + L_v g_{12}) \alpha_E(t) - (L_{21} g_{12} + L_v g_v) \alpha_v(t) + Q_v(t), \quad (6.88)$$

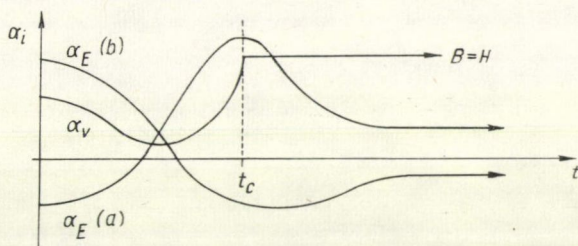
ahol

$$L_v g_v \alpha_v(t) = L_v [X_{vv}(t) + X_{Qv}(t)] = L_v X_{vv}(t) + F_v(t)$$

és  $Q_v(t) = \dot{n}_v \Phi_0$  a vortex forrás sűrűség.

Ha az  $\hat{L}\hat{g} = \hat{A}$  mátrix indefinitté válik, akkor a rendszer állapota instabilis lesz, és másodrendű fázisátalakulással normál állapotba megy át. Ez  $T = T_c$ -nél vagy  $H = H_{c2}$ -nél következik be.

A kereszt-effektusok következtében létrejövő áramok időbeli függésének egy variációját a 6.4 ábra szemlélteti.



6.4 ábra

Amint látható, a kereszt-effektusok révén is el lehet érni egy kritikus értéket. Ennél a pontnál  $\hat{L}\hat{g} = \hat{A}$  elveszti definit jellegét, tehát instabilitás miatt beáll a flux jump.

Az  $\alpha_E$  menetére kétféle lehetőség adódik, amiket az ábrán az (a) illetve (b) görbe szemléltet.

A flux jump állapotban fellépő teljes entrópia-produkció

$$\begin{aligned} \Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = \dot{\alpha}_E X_E + \dot{\alpha}_v X_v = & -L_E (g_{11} \alpha_E X_E + g_{12} \alpha_v X_E) - \\ & -L_{12} [g_{11} \alpha_E X_v + g_{12} (\alpha_E X_E + \alpha_v X_v) + g_v \alpha_v X_E] - \\ & -L_v (g_{12} \alpha_E X_v + g_v \alpha_v X_v) + Q_v X_v, \end{aligned} \quad (6.89)$$

amely jelen esetben nemcsak a spontán, hanem  $\dot{\alpha}_v = f(X_E, X_v, Q_v)$  miatt a belső forrás sűrűségéből származó tagot is tartalmazza. Ha a hővezetési együttható nem túl nagy, ez idézi elő a minta lokális felmelegedését.

## VII. rész

### AZ ÚJ EREDMÉNYEK ÖSSZEFOGLALÁSA

A Bevezetésben már utaltunk a dolgozat új tudományos eredményeire. Ott a célkitűzés indokolása és a vizsgálati módszer rövid ismertetése mellett, leíró jelleggel felhívtuk rájuk a figyelmet. Most konkrétan, képlet- és adatszerű formában, a vonatkozó saját dolgozatok megjelölésével felsoroljuk azokat.

1. Meghatároztuk a paramágneses és diamágneses szennyezők együttes hatására, az elektron szórási mechanizmusban és a Fermi-felület topológiájában létrejövő változást egyaránt tartalmazó, általános kritikus hőmérséklet formulát [91]:

$$\lambda^* v_0(\varepsilon_F^0) \operatorname{Re} \int_0^{\omega_P} d\omega \frac{th \frac{\omega}{2T_c}}{\omega + i\Gamma_s} - \lambda^* M \operatorname{Re} \int_0^{\omega_P} d\omega \frac{th \frac{\omega}{2T_c}}{\omega + i\Gamma_s} (\sqrt{\alpha - \omega} - \sqrt{\alpha^* + \omega}) = 1, \quad (7.1)$$

ahol

$$\alpha = \gamma^d \Delta Z^d \Gamma_n^d + \gamma^p \Delta Z^p \Gamma_n^p - i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} + \varepsilon_F^0 - \varepsilon_c$$

$$\alpha^* = \gamma^d \Delta Z^d \Gamma_n^d + \gamma^p \Delta Z^p \Gamma_n^p + i \frac{\Gamma_n + \Gamma_s}{2} + \varepsilon_F^0 - \varepsilon_c.$$

Kiszámítottuk azt, hogy zérus paramágneses szennyezés-koncentráció esetén  $T_c$  hogyan függ a külső  $P$ -nyomástól. A nyert reláció  $T_c$ -nek  $P$ -től való erős függését reprezentálja.

2. Meghatároztuk a paramágneses szennyezések hatására  $T_c = 0$  K határesetet előidéző  $\Delta \Gamma_{s0}$  változást [93] a) egyrészt a szórási folyamatok domináns jellege mellett, b) másrészt az esetben, amikor a Fermi-felület topológia változása dominál. Arra jutottunk, hogy az a) esetben  $M > 0$ - és  $\Delta \Gamma_{s0} > 0$ -nak megfelelően, elektron csoport jelenik meg a Brillouin-zónában, a b) eset viszont lehetőséget nyújt a topológia változás miatti  $\Delta T_c$  önmagában való kimérésére, mivel  $+\Delta Z^d$ -jú, illetve  $-\Delta Z^d$ -jú szennyezéssel az elektron-elektron kölcsönhatási potenciál izotropizálható.

3. Kísérletileg meghatároztuk az általunk előállított In (0–5 at % Bi) ötvözetek jellemző adatait és azok függését a koncentrációtól [95], [104].

Megállapítottuk, hogy  $T_c$  értéke 3,398 K-tól (0,0 at %-nál) 4,462 K-ig változik (5,0 at %-nál), és a  $T_c - C$  monoton növekvő görbe középső, meredek szakaszának kialakításában a topológia változás játsza a fő szerepet.



Az ötvözetek  $T_c$ -jének nyomásfüggésére a 0–18,2 kbar tartományban a  $-\frac{dT_c}{T_c} \sim P$  kísérleti relációt találtuk.

Azt kaptuk, hogy  $\kappa$  monoton növekvő görbe szerint változik a 0–5 at % Bi intervallumban, és pedig a 0,11 és az 1,68 között.

4. Felismertük, hogy  $C_c = 1,55$  at % kritikus koncentrációnál egy új típusú, másodrendű fázisátalakulás [108] lép fel, amely az I-es típusú szupravezetésnek II-es típusúba való átmenetelét eredményezi.

$H_c(0)$  az I-es típus tartományában 276 Oe-től 294 Oe-ig növekszik. 1,55 at %-nál a II-es típusra jellemző háromfajta kritikus mágneses tér jelenik meg, és folytonos növekedés után 5 at %-nál  $H_{c1}(0) = 323$  Oe,  $H_c(0) = 544$  Oe, és  $H_{c2} = 1682$  Oe értéket vesz fel [109].

A  $H_{ci}$  terek hőmérséklet-függésével kapcsolatban kísérletileg igazoltuk a Gorkov-formulát kis  $\kappa$ -jú anyagokra is, viszont a Ginzburg–Bardeen-, illetve a Sapoval-féle összefüggéstől jelentős szisztematikus eltérést tapasztaltunk.

5. A kísérleti flux flow feszültség-áram görbéken talált kétfajta görbület és lineáris tartomány két  $j_{0c}$  és  $q_v$  létezésére utal [116]. Arra jutottunk, hogy a kapott flux flow ellenállás értékek a

$$\frac{q_v}{q_n} = \frac{H}{H_{c2}(T)} - K \quad (7.2)$$

képlettel írhatók le helyesen.

6. Az elért technikai eredmények a következők:

a) 1,63–350 K hőmérséklet-tartományt átfedő fém-üveg kriosztát és mérőegység,

b) 45,2 kOe homogén ( $5 \cdot 10^{-3}$ /cm) mágneses teret és 18,2 kbar nyomást előállítható kombinált rendszer, amely He-hőmérsékleteken működik [97], és a hozzátartozó 100 A-es, nagy stabilitású ( $1 \cdot 10^{-3}$ /óra) szupravezető tápegység,

c) 5,5 kOe mágneses teret produkáló, szupravezető Helmholtz-tekercs [99],

d) széles tartományban működő hőmérséklet szabályozó [96], amely az 1,5–20 K intervallumban  $3 \cdot 10^{-5}$  fok/óra hőmérséklet stabilitást biztosít,

e) homogén szupravezető ötvözetek készítése hangfrekvenciás rázással, illetve ultrahangos keveréssel, amelyekben az inhomogenitás kisebb, mint 2–3 rel. %.

7. Flux creep modellünkben [117] a kvazi-elasztikusan kötött vortex köteg egyenletét és annak megoldását az

$$M_v \ddot{r} - \eta \dot{r} = -F_p^d r, \quad \text{illetve} \quad r = r_0 e^{-\eta t} \sin \omega_v t \quad (7.3)$$

formában adtuk meg. Folyamatos külső zavar esetén a nem-egyensúlyi vortex eloszlást a

$$d\Delta n_v(\mathbf{r}, t) = \Delta n_v(\mathbf{r}, t) dt - \eta \Delta n_v(\mathbf{r}, t) dt \quad (7.4)$$

differentiál-egyenlettel jellemeztük, amelynek

$$\Delta n_v(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\eta} \Delta N_v (1 - e^{-\eta t}) \quad (7.5)$$

megoldása  $t=0$ -ban  $\Delta n_v=0$ -ra vezet  $t=\infty$ -ben pedig a  $\Delta n_v = \frac{1}{\eta} \Delta N_v$  inhomogenitást jellemzi. Viszont a  $t_1$  ideig tartó külső áram kikapcsolása után  $t_2$  idővel, ha  $t_2 \rightarrow \infty$ , az egyensúlyi exponenciális visszaállását szolgáltatja.



8. A kritikus állapot leírására kidolgozott több-komponensű modellünk [120] az alábbi kétfajta kritikus áramra

$$\frac{j_{QcI} \times \Phi_0}{c} = n_k \mathbf{F}_{\max}, \quad \frac{j_{QcII} \times \Phi_0}{c} = \mathbf{F}_p - n_{kl} \mathbf{F}_{\max}, \quad (7.6)$$

illetve flux flow ellenállásra

$$\varrho_{vI} = \varrho_n \frac{H - n_k \Phi_0}{H_{c2}(T)}, \quad \varrho_{vII} = \varrho_n \frac{H}{H_{c2}(T)} \quad (7.7)$$

vezet, amikből látszik, hogy a (7.2)-beli  $K = n_k \Phi_0$ . Meghatározza továbbá a kötött vortex sűrűséget és a vortexek közötti maximális kölcsönhatási erőt:

$$n_k = \frac{1}{\varrho_n} [\varrho_{vII}(H) - \varrho_{vI}(H)] \frac{H_{c2}(T)}{\Phi_0} \quad (7.8)$$

$$F_{\max} = \frac{1}{c} \frac{\varrho_n}{\varrho_{vII} - \varrho_{vI}} \frac{j_{QcI} \Phi_0^2}{H_{c2}(T)}. \quad (7.9)$$

E modellt  $N$  különböző típusú pinning esetére is általánosítottuk.

9. Egy általános szupravezető fundamentális egyenletét a

$$\varrho_s = \frac{1}{T} \varrho_E - \frac{U_v}{T} n_v - \frac{U_Q}{T} \varrho_Q,$$

ahol

$$U_v = \frac{1}{8\pi} \Phi_0 \left[ 2h_v - \frac{\xi^2}{\Phi_0} h_c^2(\mathbf{r}) + \sum_k h_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) + 2h_Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right] \quad (7.10)$$

és

$$U_Q = \frac{1}{2} (U_e + \frac{1}{c} A v_Q + \frac{\lambda^2 m}{e} v_Q^2)$$

alakban határoztuk meg [121], amely minden lehetséges effektushoz egy-egy additív tagot rendel. Az  $U_c$ -vortex potenciál első tagja a vortex mágneses teret, második a kondenzációt, harmadik a vortex-vortex kölcsönhatást, negyedik az áram-vortex kölcsönhatást jellemzi. Az  $U_Q$ -elektron potenciál első tagja a transzport áram skaláris potenciálja, második a vektor potenciál, harmadik pedig a kinetikus energiát jellemző rész.

10. Az egyes szupravezető állapotok stabilitásának vizsgálatánál a  $\hat{g}$  és  $\hat{L}$  mátrix tulajdonságaira vonatkozó eredményeinkből [123] indultunk ki, megmutatva, hogy a termodinamikai állapot instabilitásának kiváltásához  $\hat{g}$  és  $\hat{L}$  együttes és hirtelen változása szükséges.

Kiszámítottuk a megfelelő mátrix elemeket. Közülük a vortexek állapotát, illetve mozgását közvetlenül jellemzi a

$$g_v = g_{22} = - \frac{\partial^2 \varrho_s}{\partial n_v} = \frac{1}{8\pi T} \Phi_0 \frac{\partial h_v^{\text{eff}}}{\partial n_v} \quad (7.11)$$

és az

$$L_v = L_{22} = T \frac{n_v \Phi_0}{\eta}. \quad (7.12)$$



11. A tiszta szupravezetés Meissner-állapotára kapott termodinamikai egyenleteink visszatükrözik, hogy ilyenkor sem az energia, sem a mágnesezés nem transzportálódik. Energetikai és elektromos reprezentációban viszont a London-egyenleteknek megfelelő

$$\epsilon = 0 \quad \text{és} \quad A + \lambda^2 j_{\text{sup}} = 0 \quad (7.13)$$

összefüggésekre jutottunk.

Homogén  $T$ -eloszlás esetén a vortex állapotban ható mágneses termodinamikai erő két része [125] közül

$$X_{vv} = \frac{1}{8\pi T} \nabla \left[ \Phi_0 (2\mathbf{h}_v - \frac{\xi^2}{\Phi_0^2} \Phi_0 h_c^2(\mathbf{r}) + \sum_k \mathbf{h}_v(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i)) \right] \quad (7.14)$$

a vortex-anyag és a vortex-vortex kölcsönhatást,

$$X_{Qv} = \frac{1}{4\pi T} \{ [\Phi_0 \times \text{rot } \mathbf{h}_Q] + (\Phi_0, \nabla) \mathbf{h}_Q \} \quad (7.15)$$

pedig az áram-vortex kölcsönhatást jellemzi.

Kiszámítottuk a flux flow állapotban fellépő entrópia produkciót és disszipációt, amelyek

$$\Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = j_v X_{Qv} = \frac{1}{T} \eta v_v^2 n_v \Phi_0 \quad \text{és} \quad D = T\sigma = \eta v_v^2 n_v \Phi_0. \quad (7.16)$$

A flux creep állapot leírásánál felhasználtuk a stacioner állapotok stabilitására [126] kapott relációinkat, és az

$$\dot{\alpha}_v = j_v = -L_v g_v \alpha_v + \frac{1}{cT} L_v j_Q \Phi_0 \quad (7.17)$$

egyenlet jobb oldalának második tagját a stabilis állapot fenntartásáért felelős  $F_v(t)$ -külső forrásnak tekintettük. Az így kapható

$$\dot{X}_v(t) = -g_v L_v X_{vv} + g_v F_v(t) \quad (7.18)$$

és

$$\dot{\alpha}_v(t) = -L_v g_v \alpha_v(t) + F_v(t) \quad (7.19)$$

nem-egyensúlyi, stacionárius mozgásegyenletek megoldása  $F_v(t) = F_0 = \text{konst}$  mellett

$$X_v(t) = -L_v^{-1} F_0 + L_v^{-1} F_0 e^{-g_v L_v t} \quad (7.20)$$

$$\alpha_v(t) = g_v^{-1} L_v^{-1} F_0 - g_v^{-1} L_v^{-1} F_0 e^{-L_v g_v t} \quad (7.21)$$

lesz, a szükséges külső forrás nagyságát pedig az

$$F_0 = \frac{1}{c} \frac{B j_Q \Phi_0}{\eta} \quad (7.22)$$

formula adja meg.

A pinning jelenlétében fellépő flux flow állapotra kapott

$$\dot{\alpha}_v(t) = L_v [X_{Qv} - g_v \alpha_{vc}] = L_v X_{v(\text{eff})} \quad (7.23)$$

relációnk olyan általános flux flow egyenletnek tekinthető [127], amikor a külső forrásból származó dinamikus erő mellett a pinning erők is részt vesznek a fluxus áramlás kialakításában. A kiszámított, jellemző mennyiségek közül

$$\Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = L_v(X_{Qv} - g_v \alpha_{vc}) X_{v(\text{eff})} > 0 \quad (7.24)$$

$$\epsilon = \frac{1}{c} L_v(X_{Qv} - g_v \alpha_{vc}) \quad (7.25)$$

$$Q_v = \frac{d\epsilon}{dj_Q} = \frac{1}{c} L_v \frac{dX_{v(\text{eff})}}{dj_Q} = \frac{1}{c^2 T} L_v \Phi_0 = \frac{1}{c^2} \frac{n_v}{\eta} \Phi_0^2. \quad (7.26)$$

Meghatároztuk a flux jump állapot teljes entrópia produkcióját

$$\begin{aligned} \Delta \dot{\alpha}_s = \sigma = & -L_E(g_{11}\alpha_E X_E + g_{12}\alpha_v X_E) - \\ & -L_{12}[g_{11}\alpha_E X_v + g_{12}(\alpha_E X_E + \alpha_v X_v) + g_{22}\alpha_v X_E] - \\ & -L_v(g_{12}\alpha_E X_v + g_{22}\alpha_v X_v) + Q_v X_v, \end{aligned} \quad (7.27)$$

amelyben nemcsak spontán tagok vannak, hanem  $\dot{\alpha}_v = f(X_E, X_v, Q_v)$  miatt, a belső forrás sűrűségéből származó rész is benne foglaltatik.



## FONTOSABB JELÖLÉSEK

$A$ :	vektorpotenciál	$U_v$ :	vortex-potenciál
$B$ :	mágneses indukció	$V$ :	térfogat
$C$ :	koncentráció, fajhő	$\mathcal{V}$ :	kölcsönhatási potenciál a BCS elméletben
$c$ :	fénysebesség, indexben: kritikus	$v$ :	sebesség
$c, c^+$ :	abszorpció, ill. emissziós operátor		indexben: vortex
$D$ :	diszipáció	$Z^p, Z^d$ :	valencia különbség
$d$ :	indexben: diamágneses	$x$ :	extenzív paraméter
$E$ :	belső energia	$X_k, X_{ab}$ :	általános termodinamikai erők
$e$ :	elektron töltés	$y$ :	intenzív paraméter
$\epsilon$ :	elektromos térerősség, lokális elektromos tér	$\alpha$ :	nem-egyensúlyi termodinamikai eltérés, faktorok, összegek
$F$ :	erő	$\alpha_i$ :	termodinamikai „áram”
$\mathcal{F}_m, \mathcal{F}_s$ :	szabad energiák	$\gamma$ :	elektron fajhő koefficiens, szorzó faktor
$\mathcal{F}_v, \mathcal{F}_0$ :	külső forrás	$\Gamma_n, \Gamma_s$ :	normál, illetve spin flip szórás mértéke
$G$ :	Gibbs-potenciál	$\Delta$ :	energia hézag
$g$ :	entrópia mátrix Green-függvény	$\epsilon_F$ :	Fermi-energia
$H$ :	mágneses tér	$\eta$ :	vortex belső súrlódási koefficiens
$H_c, H_{c1}, H_{c2}$ :	kritikus terek	$\kappa$ :	Ginzburg—Landau-paraméter
$\mathcal{H}, \hat{H}$ :	Hamilton-operátor	$A$ :	a szupravezető anyagra jellemző skalár
$h$ :	lokális mágneses tér	$\lambda$ :	mágneses behatolási mélység,
$I$ :	áram	$\lambda^*$ :	az elektron-elektron kölcsönhatás effektív potenciálja
$j_E$ :	energia áram sűrűség	$\mu$ :	mágneses szuszceptibilitás
$j_Q$ :	töltés áram sűrűség	$\nu$ :	frekvencia, összegezési index
$j_v$ :	vortex áram sűrűség	$\nu(\epsilon)$ :	normál egy-elektron állapotsűrűség
$L$ :	vezetési mátrix	$\xi$ :	koherencia hossz
$M$ :	mágneses momentum, effektív elektron tömeg	$\varrho, \varrho_n$ :	ellenállás
$M_v$ :	vortex köteg tömege	$\varrho_v$ :	flux flow ellenállás
$\mathcal{M}_i$ :	izotóp tömeg	$\varrho_E, \varrho_s$ :	energia, illetve entrópia sűrűség
$\mathcal{M}_q$ :	kölcsönhatási mátrix elem	$\varrho_Q, \varrho_o$ :	töltés sűrűség
$N(O)$ :	állapotsűrűség	$\Phi_0$ :	mágneses fluxus kvantum
$n_o$ :	elektron sűrűség	$\psi$ :	hullámfüggvény,
$n_v$ :	vortex sűrűség		rendeződési paraméter
$P$ :	nyomás	$\omega_q$ :	fonon frekvencia
	indexben: pinning	$\omega_D$ :	Debye-frekvencia
$R$ :	rendszer	$\chi$ :	mágneses permeabilitás
$U$ :	potenciál		
$U_Q$ :	töltés-potenciál		



## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Szeretném őszinte köszönetemet kifejezni mindazon kollégáimnak és munkatársaimnak, akik e dolgozattal kapcsolatos kutatásaim végzésében segítségemre voltak.

Megköszönöm tevékenységét *Bánkúti, Falkó, Gyurmánczi, Kiss, Kovács, Lászlóffy, Martinás, Porjesz, Reményi, Sajó, Stark, Törös, Zábráczki és Zentai* kollégáknak, akik a kísérleti feltételek biztosításában, egyes mérések, illetve számítások elvégzésében közreműködtek, és ezzel számomra határos támogatást nyújtottak.

Köszönettel adózom az ELTE Alacsony Hőmérséklet Fizikai Laboratórium gazdasági, adminisztratív és technikai dolgozóinak, akiknek munkája hozzásegített a kitűzött feladatok megoldásához.

Őszinte hálámat fejezem ki mindazoknak, akik külföldi és hazai előadásaim alkalmával megjegyzéseikkel és észrevételeikkel segítették tudományos tevékenységemet. Közülük is kiemelném *Alekszejevskij* akadémikus, *Brandt* professzor, *Hajkin*, a tudományok doktora, *Koppe* professzor, *Kürti* professzor *F. R. S.*, *Deutcher, Hlasnik, Makiej, Newhouse, Oswald* és *Wipf* tudományos kutatók nevét.

## IRODALOM

1. *K. H. Onnes*, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden №. 119, 122, 1911.
2. *W. Meissner, R. Ochsenfeld*, Naturwiss. 21, 787, 1933.
3. *B. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау*, ЖЭТФ 20, 1064, 1950.
4. *J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer*, Phys. Rev. 108, 1175, 1957.
5. *J. E. Kunzler, E. Buehler, F. S. L. Hsu, J. H. Wernich*, Phys. Rev. Lett. 6, 89, 1961.
6. *F. London, H. London*, Proc. Roy. Soc. A 149, 71, 1935.
7. *F. London*, Proc. Roy. Soc. A 152, 24, 1935.
8. *A. B. Pippard*, Proc. Roy. Soc. A 216, 547, 1935.
9. *C. J. Gorter, H. B. G. Casimir*, Phys. Z. S. 35, 963, 1934.
10. *B. Serin, C. A. Reynolds, L. B. Nesbitt*, Phys. Rev. 78, 487, 1950; 80, 761, 1951.
11. *E. Maxwell*, Phys. Rev. 78, 477, 1950.
12. *H. Frölich*, Phys. Rev. 79, 845, 1950; Proc. Phys. Soc. A 63, 778, 1950.
13. *T. H. Geballe et al*, Phys. Rev. Lett. 6, 275, 1961.
14. *D. K. Finnemore, D. E. Mapother*, Phys. Rev. Lett. 9, 288, 1962.
15. *H. London*, Proc. Roy. Soc. A 176, 522, 1940.
16. *B. B. Goodman et al*, Phys. Rev. 102, 656, 1956.
17. *L. N. Cooper*, Phys. Rev. 104, 1189, 1956.
18. *D. Saint-James, P. G. de Gennes*, Phys. Lett. 7, 306, 1963.
19. *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*, Статистическая физика Изд. Наука, Москва, 1964.
20. *Л. П. Горьков*, ЖЭТФ 36, 1918, 1959, 37, 833, 1959.
21. *А. А. Абрикосов*, ЖЭТФ 32, 1442, 1957.
22. *D. Cribier et al*, Phys. Lett. 9, 109, 1964.
23. *W. Fite, A. G. Redfield*, Phys. Rev. Lett. 17, 381, 1966.
24. *V. Essman, H. Trauble*, Phys. Lett. 24, 526, 1967.
25. *R. P. Feynman*, Progress in Low Temp. Phys. Vol. I., ed C. J. Gorter. North Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1955.
26. *L. Onsager*, Nuovo Cim. Suppl. 2., 6. 249. 1949.
27. *Б. Г. Лазаров, Л. С. Лазарова, В. И. Макаров*, ЖЭТФ, 43, 2311, 1962.
28. *Л. П. Горьков*, ЖЭТФ, 34, 735, 1958.
29. *Б. Г. Лазаров, Л. С. Лазарова, В. И. Макаров, Т. А. Игнатъева*, ЖЭТФ, 46, 829, 1964.
30. *А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков*, ЖЭТФ, 39, 1781, 1960.
31. *F. Reif, M. A. Woolf*, Phys. Rev. Lett. 9, 316, 1962.
32. *D. Markowitz, L. P. Kadanoff*, Phys. Rev. 131, 564, 1963.
33. *В. Г. Барьяхтар, И. И. Фалько, В. И. Макаров*, ЖЭТФ 49, 1858, 1965.
34. *И. М. Лифшиц*, ЖЭТФ, 38, 1569, 1960.
35. *Я. С. Кан, Б. Г. Лазаров, А. И. Судовцов*, ДАН СССР. 68, 173, 1949.
36. *L. D. Jennings, C. A. Swenson*, Phys. Rev. 112, 31, 1958.
37. *В. И. Макаров, И. Я. Вольнский*, Письма в ЖЭТФ. 4, 369, 1966.
38. *Т. А. Игнатъева, В. И. Макаров, Н. С. Терешина*, ЖЭТФ, 54, 1617, 1968.



39. В. И. Макаров, В. Г. Барьяхтар, ЖЭТФ, 48, 1717, 1965.
40. C. W. Chu, T. F. Smith, W. E. Gardner, Phys. Rev. B 1, 214, 1970.
41. В. Г. Барьяхтар, В. В. Гани, В. И. Макаров, Т. А. Игнатъева, ЖЭТФ. 62, 1118, 1972.
42. C. Caroli and K. Maki, Phys. Rev. A159, 306, 316, 1967.
43. C. Caroli and K. Maki, Phys. Rev. A164, 591, 1967.
44. L. P. Kadanoff and J. J. Falko, Phys. Rev. A136, 1170, 1964.
45. M. Cardona, G. Fischer and B. Rosenblum, Phys. Rev. Lett. 12, 101, 1964.
46. B. Rosenblum and M. Cardona, Phys. Rev. Lett. 12, 657, 1964.
47. A. Schmid, Phys. Kond. Mat. 5, 302, 1966.
48. И. О. Кулик, ЖЭТФ. 50, 1617, 1966.
49. C. Caroli, K. Maki, Phys. Rev. A169, 381, 1968.
50. A. M. Clogston, Phys. Rev. Lett. 9, 266, 1962.
51. B. S. Chandrasekhar, Appl. Phys. Lett. 1, 7, 1962.
52. P. Fulde, R. A. Ferrell, Phys. Rev. A135, 550, 1964.
53. K. Maki, Physics 1, 21, 127, 201, 1964.
54. C. Caroli, P. G. de Gennes, J. Matricon, Phys. Lett. 9, 307, 1964.
55. B. S. Deaver, W. M. Fairbank, Phys. Rev. Lett. 7, 43, 1961.
56. R. Doll, M. Näbauer, Phys. Rev. Lett. 7, 51, 1961.
57. J. Bardeen, M. J. Stephen, Phys. Rev. A140, 1197, 1965.
58. J. Bardeen, Rev. Mod. Phys. 34, 667, 1962.
59. G. B. Yntema, Phys. Rev. Lett. 18, 642, 1967.
60. W. A. Reed, E. Fawcett, Y. B. Kim, Phys. Rev. Lett. 14, 790, 1965.
61. W. F. Druyvesteyn, G. J. van Grup, C. A. Greebe, Phys. Lett. 22, 248, 1966.
62. B. Maxfield, Solid State Comm. 5, 585, 1967.
63. A. J. van Vijfeyken, A. K. Niessen, Philips. Res. Rep. 20, 505, 1965.
64. W. F. Vinen A. C. Varren, Proc. Phys. Soc. 91, 409, 1967.
65. A. J. van Vijfeyken, A. K. Niessen, Phys. Lett. 16, 23, 1965.
66. H. W. Lewis, Phys. Rev. 92, 1149, 1953.
67. P. W. Anderson, Rev. Mod. Phys. 38, 298, 1966.
68. J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. 11, 200, 1963.
69. R. C. Jaklevic et al, Phys. Rev. Lett. 12, 159, 1964.
70. B. D. Josephson, Rev. Mod. Phys. 36, 216, 1964.
71. Y. B. Kim, C. F. Hempstead, A. P. Strnad, Phys. Rev. A139, 1163, 1965.
72. Y. B. Kim, C. F. Hempstead, A. R. Strnad, Phys. Rev. Lett. 12, 145, 1964.
73. Y. B. Kim, C. F. Hempstead, A. R. Strnad, Phys. Rev. Lett. 13, 794, 1964.
74. K. A. Jones and R. M. Rose, Phys. Lett. A27, 412, 1968.
75. J. R. Clem, Phys. Rev. Lett. 20, 735, 1968.
76. И. Н. Гончаров и И. С. Хухарева, ЖЭТФ. 62, 627, 1972.
77. W. Hackett, E. Maxwell and Y. B. Kim, Phys. Lett. A24, 663, 1967.
78. Л. П. Горьков и Н. Б. Коннин, ЖЭТФ. 60, 2331, 1971.
79. М. Ю. Куприянов и К. К. Лухарев, Писма в ЖЭТФ. 15, 349, 1972.
80. D. E. Farrel, I. Dinewitz and B. Chandrasekhar, Phys. Rev. Lett. 16, 438, 1966.
81. R. G. Jones, E. H. Roderich and A. C. Rose-Innes, Phys. Lett. A24, 318, 1967.
82. K. Yamafuji and F. Irie, Phys. Lett. A25, 387, 1967.
83. M. D. Sherril and J. E. Payne, Phys. Lett. A38, 313, 1972.
84. P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 9, 309, 1962.
85. R. D. Dunlap, C. F. Hempstead and Y. B. Kim, Journ. Appl. Phys. 34, 3147, 1963.
86. S. L. Wipf, Phys. Rev. 161, 404, 1967.
87. F. Irie and K. Yamafuji, Journ. Phys. Soc. Jap. 23, 255, 1967.
88. C. R. Wischmeyer, Phys. Lett. 18, 100, 1965; 19, 543, 1965; 20, 578, 1966.
89. И. М. Лифиши, М. И. Каганов, УФН. 69, 419, 1959; 78, 411, 1962.
90. Л. Каданов, Г. Вейм: Квантовая Статистическая Механика, Изд. Мир, Москва, 1964.
91. I. Kirschner, A. Stark, I. I. Falko, Acta Phys. Hung. 29., 243, 1970.
92. M. F. Merriam, S. M. Liu, D. P. Seraphim, Phys. Rev. A136, 17, 1964.
93. I. Kirschner, A. Stark, Acta Phys. Hung. 30, 33, 1971.
94. J. E. Crow, R. D. Parks, Phys. Lett. 21, 378, 1966.
95. И. Киришнер, Й. Банкути, Дь. Киши, И. Ковач, Л. Ласлоффи, Дь. Ремени, К. Шайо, ЖЭТФ. 66, 2141, 1974.
96. I. Kirschner, T. Porjesz, P. Zentai, Gy. Kiss, Gy. Reményi: Cryogenics 14, 559, 1974.



97. *I. Kirschner, I. Kovács, L. Lászlóffy*, Proc. of 4. Intern. Cryogenic Eng. Conf., p. 372. Eindhoven, 1972.
98. *L. D. Jennings, C. A. Swenson*: Phys. Rev. 112, 31, 1958.
99. *И. Киришнер, Дь. Ремени, Т. Порес, П. Зентаи, Дь. Дюрманци*: Сообщ. 12. Междунар. Конф. Физ. и Техн. Низк. Темп., стр. 143. Секешфехервар, 1973.
100. *W. A. Fietz*, Rev. Sci. Inst. 36, 1621, 1965.
101. *T. Kinsel, E. A. Lynton, B. Serin*, Phys. Lett. 3, 30, 1962.
102. *T. Kinsel, E. A. Lynton, B. Serin*, Rev. Mod. Phys. 36, 105, 1964.
103. *D. P. Seraphim, C. Chiou, D. J. Quinn*, Acta Met. 9, 861, 1961.
104. *И. Киришнер, И. Ковач, Й. Банкути, Л. Ласлоффи*: Сообщ. 12. Междунар. Конф. Физ. и Техн. Низк. Темп., стр. 99. Секешфехервар, 1973.
105. *B. B. Goodman*: IBM J. Res. Develop. 6, 63, 1961.
106. *T. E. Faber*, Proc. Roy. Soc. A241, 531, 1957.
107. *C. A. Bryant, P. H. Keesom*, Phys. Rev. 123, 491, 1961.
108. *I. Kirschner*, Phys. Lett. A. 47, 139, 1974.
109. *И. Киришнер, Й. Банкути, Дь. Киши, Л. Ласлоффи*: Сообщ. 12. Междунар. Конф. Физ. и Техн. Низк. Темп., стр. 24. Секешфехервар, 1973.
110. *B. Л. Гинзбург*, ЖЭТФ 30, 539, 1956.
111. *J. Bardeen*, Phys. Rev. 95, 554, 1954.
112. *E. A. Шаповал*, ЖЭТФ 41, 877, 1961.
113. *B. Mühlischlegel*, Z. Phys. 155, 313, 1959.
114. *E. Helfand, N. R. Werthamer*, Phys. Rev. 147, 288, 1966.
115. *A. Echarri, et al*, Phil. Mag. 18, 1089, 1968.
116. *I. Kirschner, J. Bánkúti, J. Zábrázki*: Proc. of Europhys. Low Temp. Conf., p. 36. Freudenstadt, 1972.
117. *I. Kirschner*: Acta Phys. Hung. 36, 149, 1974.
118. *A. M. Campbell, J. E. Evetts, D. Dew—Hughes*, Journ. Phys. 1, 715, 1968.
119. *J. I. Gittleman, B. Rosenblum*, Phys. Rev. Lett. 16, 734, 1966.
120. *I. Kirshner, K. Martinás*, Acta Phys. Hung. 30, 331, 1971.
121. *I. Kirshner, K. Martinás, R. Törös*, Acta Phys. Hung. 37, 17, 1974.
122. *P. G. de Gennes*: Superconductivity of Metals and Alloys. Benjamin Inc., New York, 1966.
123. *I. Kirschner*, Acta Phys. Hung. 29, 319, 1970.
124. *P. R. Solomon, F. A. Otter*, Phys. Rev. A. 164, 608, 1967.
125. *И. Киришнер, К. Мартинаш*, Сообщ. 12. Междунар. Конф. Физ. и Техн. Низк. Темп., стр. 97. Секешфехервар, 1973.
126. *I. Kirschner*, Acta Phys. Hung. 30, 61, 1971.
127. *I. Kirschner, K. Martinás*, Journ. Low. Temp. Phys. 14, 427, 1974.



## TARTALOMJEGYZÉK

BEVEZETÉS .....	405
I. rész	
A SZUPRAVEZETÉS ALAPVETŐ JELENSÉGEI .....	408
1. I-es típusú szupravezetők .....	408
2. II-es típusú szupravezetők .....	414
II. rész	
IRODALMI ÖSSZEFOGLALÁS .....	418
1. Mágneses szennyezések .....	418
2. A vortexek tulajdonságai .....	421
III. rész	
PARA- ÉS DIAMÁGNESES SZENNYEZÉSEK EGYÜTTES HATÁSA A SZUPRA- VEZETÉSI ÁTMENETRE .....	427
1. Bevezetés .....	427
2. A szupravezető Green-függvény egyenletei .....	427
3. A szennyezési kritikus hőmérséklet meghatározása .....	431
4. Szennyezések miatti szupravezetés $T_c = 0$ K közelében .....	434
IV. rész	
A SZTATIKAI ÉS DINAMIKAI VORTEX ÁLLAPOT KÍSÉRLETI VIZSGÁLATA KIS $\kappa$ -JÚ SZUPRAVEZETŐKBEN .....	437
1. Bevezetés .....	437
2. Vizsgálati eljárások, mérőberendezés .....	437
3. $T_c$ és $\kappa$ függése az ötvöző koncentrációtól .....	442
4. Egy új típusú fázisátalakulás .....	446
5. $H_{ci}$ függése a hőmérséklettől .....	447
6. Specifikus fluxus áramlás .....	449
7. Következtetések .....	453
V. rész	
A VORTEX MOZGÁS ELMÉLETI VIZSGÁLATA .....	454
1. Bevezetés .....	454
2. A flux creep állapot kvazi-elasztikusan kötött vortex modellje .....	454
3. A kritikus állapot több-komponensű modellje .....	456
VI. rész	
SZUPRAVEZETŐ MÁGNESES ÁLLAPOTOK TERMODINAMIKAI STABILITÁSA .....	460
1. Bevezetés .....	460
2. A teljes entrópia sűrűség kiszámítása .....	461
3. Stabilitás .....	464
3.1 Normál állapot .....	466
3.2 Szupravezetés .....	466
3.3 Vortex állapot .....	468
3.4 Flux flow .....	470
3.5 Flux creep .....	471
3.6 Flux flow pinning jelenlétében .....	473
3.7 Flux jump .....	474
VII. rész	
AZ ÚJ EREDMÉNYEK ÖSSZEFOGLALÁSA .....	476
Fontosabb jelölések .....	481
Irodalom .....	482
Köszönetnyilvánítás .....	482





## *A IUPAP hírei*

### **AZ 1975—78. HÁROM ÉVES PERIÓDUSRA MEGVÁLASZTOTT IUPAP TISZTSÉGVISELŐK NÉVSORA**

#### **Executive committee**

President:	C. C. Butler University of Technology LOUGHBOROUGH Leicestershire United Kingdom LE11 3TU
Past President:	H. Maier—Leibnitz Deutsche Forschungsgemeinschaft Kennedyallee 40 5300 BONN—BAD GODESBERG 1 Federal Republic of Germany
First Vice-President:	L. Sosnowski Institute of Experimental Physics University of Warsaw Hoza 69 00—681 WARSZAWA Poland
Vice-Presidents:	A. Abragam, France D. A. Bromley, USA R. Kaischew, Bulgaria R. Kubo, Japan A. Salam, UK R. Street, Australia B. M. Vul. USSR H. Wergeland, Norway
Secretary-General:	L. Kerwin Bureau du Rectur Université Laval QUÉBEC Canada G1K 7P4
Associate Secretary-General	J. S. Nilsson Institute of Theoretical Physics Fack S—402 20 GÖTEBORG 5 Sweden

## Szakbizottságok

## C1 — FINANCIAL COMMISSION

C. C. Butler, United Kingdom  
D. A. Bromley, USA

## C2 — COMMISSION FOR SYMBOLS, UNITS AND NOMENCLATURE (SUN)

Chairman: U. Stille

Secretary: L. Villena

Physikalisch-Technische  
Bundesanstalt  
Bundesallee 100

Avenida de la Habana 147  
MADRID 33  
Spain

D—33 BRAUNSCHWEIG  
Federal Republic Germany

Members: A. Bray, Italy  
J. De Boer, The Netherlands  
E. Djakov, Bulgaria  
H. H. Jensen, Denmark  
K. Nagy, Hungary

I. I. Novikov, USSR  
S. Pasternak, USA  
J. Rossel, Switzerland  
T. Tako, Japan  
A. R. Verra, India

## C3 — COMMISSION ON THERMODYNAMICS AND STATISTICAL MECHANICS

Chairman: H. B. Callen

Secretary: P. C. Hemmer

Department of Physics  
University of Pennsylvania  
PHILADELPHIA, Penn 19104  
USA

Institute of Physics  
Norges Tekniske Hogskole  
TRONDHEIM  
Norge

Members: L. P. Gorkov, USSR  
H. Haken, FRG  
B. Jancovici, France  
C. G. Kuper, Israel  
P. T. Landsberg, United Kingdom

H. Mori, Japan  
P. Résibols, Belgique  
P. Szépfalusy, Hungary  
C. J. Thompson, Australia  
N. G. van Kampen, The Netherlands

## C4 — COMMISSION ON COSMIC RAYS

Chairman: A. J. Somogyi

Secretary: S. Miyake

Department of Cosmic Rays  
Central Research Institute  
Physics  
P. O. Box 49  
BUDAPEST 114  
Hungary

Cosmic Ray Laboratory  
University of Tokyo  
Midorincho 3—2—1  
Tansshi-shi  
TOKYO 188  
Japan

Members: A. E. Chudakov, USSR  
R. R. Daniel, India  
R. Gall, Mexico  
B. Peters, Denmark

K. Pinkau, FRG  
H. Reeves, France  
C. J. Waddington, USA  
A. W. Wolfendale, United Kingdom

## C5 — COMMISSION ON VERY LOW TEMPERATURE PHYSICS

Chairman: W. J. Huiskamp

Secretary: D. F. Brewer

Kamerlingh Onnes Laboratorium

School of Math. and Phys.  
Sciences



University of Leiden  
Nieuwsteeg 18  
LEIDEN  
The Netherlands

Members: E. L. Andronikashvili, USSR  
N. B. Brandt, USSR  
W. Klose, FRG  
S. Nakajima, Japan  
F. Scaramuzzi, Italy

University of Sussex  
Falmer  
BRIGHTON, Sussex  
United Kingdom  
I. M. Templeton, Canada  
M. Tinkham, USA  
R. Tournier, France  
C. V. H. Wilson, Australia

#### C 6 — COMMISSION ON PUBLICATIONS

Chairman: B. R. Coles  
Department of Solid  
State Physics  
Imperial College  
Prince Consort Road  
LONDON SW 7  
United Kingdom

Members: J. Descloizeaux, France  
I. E. Dzyaloshinsky, USSR  
  
J. Hamilton, Denmark  
R. Hearing, Canada  
K. Kinoshita, Japan

Secretary: N. R. Nilsson  
Physics Department  
University of Uppsala  
Box 530  
S—751 21 UPPSALA 1  
Sweden

J. A. Krumhansl, USA  
J. Kvasnica,  
Czechoslovakia  
A. W. K. Metzner, USA  
P. Papali, Italy  
A. C. van der Leun,  
The Netherlands

Associate Member from ICSU—AB: J. Ziman, United Kingdom

#### C7 — COMMISSION ON ACOUSTICS

Chairman: E. A. G. Shaw  
Division de Physique  
Conseil National de  
Recherches  
OTTAWA  
Canada, K1A 0R6

Members: A. Barone, Italy  
R. T. Bayer, USA  
J. P. E. Bosquet, Belgique  
H. G. Diestel, FRG  
C. G. Fant, Sweden

Secretary: B. L. Clarkson  
Inst. of Sound Vibration  
Research  
The University  
SOUTHAMPTON  
United Kingdom SO9  
5NH

L. Filipczynski, Poland  
J. Igarashi, Japan  
A. Lara Saenz, Spain  
L. Liamshev, USSR  
B. S. Ramakrishna, India

Associate Member from IUPS: U. Jurato, Italy

Associate Member from IUTAM: M. G. Lighthill, United Kingdom

#### C8 — COMMISSION ON SEMICONDUCTORS

Chairman: V. M. Tuchkevich  
Physico-Technical Inst.  
  
Academy of Sciences of  
the USSR

Secretary: O. Madelung  
Inst. of Theoretical  
Physics  
University Marburg  
Mainzer Gasse 33



Polytechnical str. 26

LENINGRAD K—21  
USSR

Members: F. Bassani, Italy

C. Benoit, France  
M. L. Cohen, USA  
R. Enderlein, GDR

D—3550 MARBURG/  
LAHN  
FRG

C. Hilsum, United  
Kingdom  
A. Many, Israel  
T. Uemura, Japan  
W. Zawadzki, Poland

#### C9 — COMMISSION ON MAGNETISM

Chairman: G. de Vries  
Natuurkundig Laboratorium  
Univ. van Amsterdam  
Valckenierstraat 65  
AMSTERDAM—C  
The Netherlands

Secretary: H. B. Møller  
Physics Department  
Atomic Energy Research  
Establishment  
RISØ  
4000 ROSKILDE  
Denmark  
E. A. Turov, USSR  
R. Vijayaraghavan, India  
J. Villain, France  
E. P. Wohlfarth,  
United Kingdom  
W. Zinn, FRG

Members: Z. Frait, Czechoslovakia  
J. Kanamori, Japan  
W. Low, Israel  
L. Pal, Hungary  
  
M. B. Stearns, USA

#### C10 — COMMISSION ON SOLID STATE PHYSICS

Chairman: G. Szigeti  
Research Inst. for  
  
Technical Physics  
Hungarian Academy  
of Sciences  
Postfach 76 — Újpest 1  
  
1325 BUDAPEST  
Hungary

Secretary: G. K. White  
National Measurement  
Lab.  
C. S. I. R. O.  
Sydney University  
Grounds  
CHIPPENDALE,  
N. S. W. 2008  
Australia  
  
F. Fumi, Italy  
L. V. Keldysh, USSR  
A. Keller, United Kingdom  
T. Matsubara, Japan  
P. Nozières, France

Members: S. Amelinckx, Belgique  
M. Balarin, GDR  
D. D. Barb, Romania  
L. Bru, Spain  
H. Ehrenreich, USA

Associate Member from IUCr: J. M. Cowley, USA

#### C11 — COMMISSION ON PARTICLES AND FIELDS

Chairman: B. P. Gregory  
C. N. R. S.  
15, quai Anatole France  
75700 PARIS  
France

Secretary: E. L. Goldwasser  
National Accelerator Lab.  
P. O. Box 500  
BATAVIA, Ill. 60510  
USA



Members: M. Conversi, Italy

H. Harari, Israel  
F. E. Low, USA  
W. Paul, FRG

L. Solov'yov, USSR

## C12 — COMMISSION ON NUCLEAR PHYSICS

Chairman: H. Faraggi—Mathieu  
Dépt. de Physique nucléaire

Commissariat à l'énergie  
atomique

53 rue Fontaine-Grelot  
BOURG—LA—REINE  
F—92340  
France

Members: F. Ajzenberg—Selove, USA

S. T. Belyaev, USSR  
B. Mottelson, Denmark  
M. Petrascu, Romania  
R. A. Ricci, Italy

G. H. Stafford, United  
Kingdom

G. Takeda, Japan  
A. N. Tavkhelidze, USSR  
P. Falk-Vairant,  
Switzerland  
A. K. Wroblewski, Poland

Secretary: T. Mayer—Kuckuk  
Radiation and Nuclear  
Physics  
Institute  
Faculty of Maths and  
Nat.  
Sciences

University of Bonn  
Nullallee 14—16  
D—53 BONN  
FRG

B. M. Spicer, Australia  
K. Sugimoto, Japan  
I. Ulehla, Czechoslovakia  
Z. Wilhelmi, Poland  
J. C. Willmott, United  
Kingdom

## C13 — COMMISSION ON ATOMIC MASSES AND FUNDAMENTAL CONSTANTS

Chairman: E. R. Cohen  
Science Center  
Rockwell International  
1049 Camino des Rios  
THOUSAND OAKS, Calif. 91360  
USA

Secretary: R. C. Barber  
Department of Physics  
University of Manitoba  
WINNIPEG  
Canada R3T 2N2

Members: W. Benenson, USA  
P. Dean, United Kingdom  
V. I. Goldansky, USSR

W. H. Johnson, USA

W. Kündig, Switzerland  
K. Ogata, Japan  
J. H. Sanders, United  
Kingdom  
J. Terrien, France

## C14 — COMMISSION ON PHYSICS EDUCATION

Chairman: A. P. French  
Room 20—C—224  
Dept of Physics  
Massachusetts Inst of  
Technology  
CAMBRIDGE, Mass. 02139  
USA

Secretary: J. L. Lewis  
Physics Department  
Malvern College  
MALVERN  
Worcestershire  
United Kingdom

Members: G. Delacote, France  
 Y. Kakiuchi, Japan  
 A. Loria, Italy  
 P. Mariens, Belgium  
 G. Marx, Hungary

A. N. Matveyev, USSR  
 M. Mokhtar, Egypt  
 M. A. Moreira, Brazil  
 B. Ronne, Sweden

Associate Member from ICSU—CTS: W. C. Kelly, USA

#### C15 — COMMISSION ON ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS AND SPECTROSCOPY

Chairman: J. B. Hasted  
 Physics Department  
 Birkbeck College  
 Malet Street  
 LONDON WC1E 7HU  
 United Kingdom

Secretary: G. zu Putlitz  
 I. Phys. Institut Univer-  
 sität  
 Philosophenweg 12  
 D—69 HEIDELBERG  
 FRG

Members: J. Brossel, France  
 A. Gozzini, Italy  
 R. N. Iliin, USSR  
 Y. Kaneko, Japan  
 J. Kistemaker, The  
 Netherlands

L. Krause, Canada  
 C. Nordling, Sweden  
 H. Pfeifer, GDR  
 A. L. Schawlow, USA

R. Velasco, Spain

#### C16 — COMMISSION ON PLASMA PHYSICS

Chairman: R. S. Pease  
 Culham Laboratory  
 CULHAM, Abingdon  
 Berkshire  
 United Kingdom

Secretary: M. B. Gottlieb  
 Plasma Physics Laboratory  
 Princeton University  
 P. O. Box 451  
 PRINCETON, N. J.  
 08540 USA

Members: C. M. Braams, The Netherlands  
 B. Brunelli, Italy  
 G. Ecker, FRG  
 P. K. Kaw, India  
 J. Kracik, Czechoslovakia

K. Nishikawa, Japan  
 A. Rutscher, GDR  
 R. Z. Sagdeev, USSR  
 P. van den Plas, Belgium  
 H. Wilhelmsson, Sweden

#### C17 — COMMISSION ON QUANTUM ELECTRONICS

Chairman: B. Lax  
 F. B. National Magnet Lab.  
 Massachusetts Inst of  
 Technology  
 179 Albany Street

Secretary: K. Junge  
 Central Institute of Optics  
 Academy of Sciences  
 Rudower Chaussee  
 1199 BERLIN—  
 ADLERSHOF  
 GDR

CAMBRIDGE, Mass. 02139  
 USA

Members: D. J. Bradley, United Kingdom  
 K. Hamal Czechoslovakia  
 A. Piekara, Poland

K. Shimoda, Japan  
 A. M. Prokhorov, USSR



**Affiliated Commissions****A.C.1 — INTERNATIONAL COMMISSION FOR OPTICS (ICO)**

- President:** W. H. Steel, Australia
- Vice-Presidents:** K. M. Baird, Canada  
 B. Billings, USA  
 A. Fiorentini, Italy  
 B. Havelka, Czechoslovakia  
 H. Koehler, FRG  
 K. Kinoshita, Japan
- Secretary-General and Treasurer:** J. C. Viénot  
 Laboratoire d'Optique  
 Université de Besançon  
 20530 BESANCON  
 France
- IUPAP Delegate:** T. Skalinski  
 Dept of Optics and Radiospectroscopy  
 Institute of Physics  
 Polish Academy of Science  
 Al. Lotnikow 32  
 02—668 WARSZAWA  
 Poland

**A.C.2 — INTERNATIONAL COMMISSION ON GENERAL RELATIVITY AND GRAVITATION**

- IUPAP Delegates:** W. M. Fairbank, USA  
 V. L. Ginzburg, USSR  
 M. A. Tonnelat, France  
 A. Trautman, Poland
- Secretary:** A. Mercier  
 Institut de Physique Théorique  
 Université de Berne  
 Sidlerstrasse 5  
 3012 BERNE  
 Switzerland

**IUPAP delegáltak különböző uniók közötti bizottságokhoz**

- IU.1 — International Council of Scientific Unions (ICSU)**  
 C. C. BUTLER, University of Technology, Loughborough,  
 Leicestershire, LE11 3TU, UNITED KINGDOM.
- I.U.2 — Scientific Committee on Oceanic Research (SCOR)**  
 W. A. NIERENBERG, Scripps Inst. Oceanography, La Jolla  
 Calif. 92037, USA.
- I.U.3 — Special Commission of Space Research (COSPAR)**  
 B. PETERS, Danish Space Research Institute, Lundtoftevej  
 7, Lungby 2800, DENMARK.

- I.U.4 — Inter-Union Commission on Solar Terrestrial Physics (SCOSTEP)  
B. PETERS, Danish Space Research Institute, Lundtoftevej  
7, 2800 Lungby, DENMARK.
- I.U.5 — Committee on Data for Science and Technology (CODATA)  
E. R. COHEN, Science Center, Rockwell International, 1049  
Camino dos Rios, Thousand Oaks, Calif. 91360, USA.
- I.U.6 — Macromolecular Division Committee of IUPAC  
G. W. BECKER, Bundesanstalt für Materialprüfung, Unter  
den Eichen 87, D-1 Berlin 45, BRD.
- I.U.7 — ICSU — Abstracting Board  
J. ZIMAN, Physics Department, Bristol University, Bristol  
BS8 1 TL, UNITED KINGDOM.
- I.U.8 — Committee on the Teaching of Science (ICSU)  
W. C. KELLY, National Research Council, 2101 Constitu-  
tion Avenue, Washington, D. C. 20418, USA.
- I.U.9 — European Physical Society (EPS)  
C. C. BUTLER, University of Technology, Loughborough,  
Leicestershire LE 11 3TU, UNITED KINGDOM.
- I.U.10 — SCOPE:\* A. Lara Saenz  
Centro de Investigaciones Fisicas  
Serrano 144  
MADRID 6  
Spain
- I.U.11—COSTED:\*\* S. Bhagavantam  
Indian Institute of Science  
BANGALORE 560 012  
India
- I.U.12. — ICSU —  
SPECTROSCOPY: I. Kovács  
Department of Atomic Physics  
Polytechnical University  
Budafoki út 8.  
1521 BUDAPEST  
Hungary  
N. F. Ramsey  
Lyman Physical Laboratory  
Harvard University  
CAMBRIDGE, Mass 02138  
USA  
I. I. Sobelman  
c/o Dr. S. Markyanov  
IUPAP National Committee  
Academy of Sciences  
Leninsky prospect 14  
MOSCOW B—71  
USSR  
H. Walther  
Lotharstrasse 135



D—53 BONN

FRG

I.U.13 — B.I.P.M.:\*\*\*

J. deBoer

Instituut voor Theoretische Fysica

Universiteit van Amsterdam

Valckenierstraat 65

AMSTERDAM—O

The Netherlands

I.U.14— IUPAC UNITS: U. Stille

Physikalische-Technische Bundesanstalt

Bundesallee 100

D—33 BRAUNSCHWEIG

FRG

\* Special Committee, on Problems of the Environment.

\*\* Committee on Science and Technology in Developing Countries.

\*\*\* Bureau International des Poids et Mesures.

Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1976. május 28. Terjedelem: 8,05 (A/5) ív  
76-2305 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József ig.

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.

## TARTALOMJEGYZÉK

*Kirschner István*: Szupravezetők mágneses állapotai ..... 405

### A IUPAP HÍREI

Az 1975—78 három éves periódusra megválasztott IUPAP tisztségviselők névsora ..... 487



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

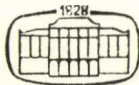
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXIV. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1976

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről levalasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetet és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését, a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# VIZSGÁLATOK AZ ÁRAMINSTABILITÁSOK KÖRÉBŐL FÉLVEZETŐKBEN\*

PATAKI GYÖRGY

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest  
Doktori értekezés, készült 1974-ben. Megvédve 1975-ben. Érkezett 1976. febr. 10.

## TARTALOMJEGYZÉK

### Bevezetés

I. Az áraminstabilitások áttekintése .....	498
1. A kísérleti tények rövid ismertetése .....	498
2. Az áraminstabilitások fenomenológikus leírásához szükséges alapvető egyenletek .....	508
II. A tiszta tértöltési hullámok elmélete .....	511
1. Az elmélet kritikai áttekintése .....	511
2. A domén-alak-paraméterek (DAP) módszere .....	518
a) A DAP-módszer rekombinációs instabilitás esetében .....	518
b) A DAP-módszer alkalmazása Gunn-effektusra .....	527
3. A csapdák hatásának vizsgálata a DAP-módszer segítségével .....	531
4. A rekombinációs- és Gunn-domének közötti analógia korlátjáról .....	539
III. A DAP-módszer eredményeinek összehasonlítása számítógépes vizsgálatokkal és kísérleti eredményekkel .....	544
1. Összehasonlítás Sacks és Milnes számítógépes vizsgálataival: rézzel kompenzált GaAs .....	545
2. A diffúzió térfüggésének hatása a Gunn-domének sebességére .....	547
3. A rekombinációs domének mozgása arannyal kompenzált Ge-ban .....	550
4. A lassú domének eredetéről feszítgető GaAs-ben .....	553
IV. Külső perturbáció hatása a stationerén mozgó doménekre .....	555
1. Külső perturbáció hatása a Gunn-doménekre .....	555
2. Külső perturbáció hatása a rekombinációs doménekre .....	558
3. A Gunn-domének modulálhatóságáról .....	560
V. Egy új modell negatív differenciális vezetőképessége [NDV] áram-feszültség karakterisztika létrehozására .....	561
1. A rekombináció kinetikája diszlokációk esetén: Glaenzer és Jordan modelljének meg- javítása .....	561
2. Forró-elektronok befogása diszlokációkon .....	566
3. Forró-elektronok szóródása diszlokációkon .....	571
4. A NDV lehetőségének vizsgálata .....	573
VI. Rekombinációs hullámok diszlokációkkal .....	575
1. A rekombinációs hullámok elméletének rövid áttekintése .....	576
2. Kvázi-neutrális rekombinációs hullámok diszlokációkkal .....	579
3. Alkalmazás szilíciumra és germániumra, az eredmények diszkussziója .....	583
VII. Az eredmények összefoglalása, javaslatok .....	587
Irodalmi hivatkozások .....	589
Köszönetnyilvánítás .....	593

### Bevezetés

1964-ben a párizsi félvezető konferencián B. K. Ridley és J. B. Gunn még külön szekciókban számoltak be az általuk megfigyelt áramoszillációkról. Akkor még nem lehetett látni, hogy a Ridley által germániumban észlelt igen alacsony frekvenciás oszcillációknak és a Gunn által gallium-arszenidben megfigyelt és mikrohullámú



tartományba eső rezgéseinek azonos fizikai háttere van. Az elmúlt évtizedben azután igen intenzív kutatás indult meg a felmerült kérdések tisztázására és ma már az áraminstabilitások területe a félvezető-kutatás önálló ága lett.

Az igen intenzív kutatásnak két oka van. Az egyik ok, hogy a szilárdtest kutatások eddig nem ismert területének, az *egyensúlytól lényegesen távoli rendszereknek* a vizsgálatára nyílt lehetőség, amely, mint „gazdag fenomenológiájú” terület tág teret adott az elméleti és kísérleti vizsgálatoknak.

A másik, természetesen korán felismert ok, hogy az áraminstabilitások várhatóan könnyen hasznosítható *aktív félvezető eszközöket* eredményezhetnek, ha megfelelő paraméterekkel rendelkező alanyanyagot sikerül előállítani. Az elmúlt évtized kutatásai, mint ismeretes, minden vonatkozásban igazolták a várákozást.

Természetesen 1964 előtt is jelentek meg különböző típusú oszcillációkkal, áraminstabilitásokkal foglalkozó dolgozatok. Ilyen instabilitás volt az elektron-lyuk gáz plazma-szerű viselkedésével leírható „helical-instabilitás”, amelynek kísérleti vizsgálatával 1963-ban kezdtem foglalkozni. Később, 1966-ban, amikor *Kroemer* rámutatott arra, hogy a Gunn-effektus is a Ridley-féle modell alapján tárgyalható, érdeklődésem a domén-instabilitások felé fordult.

Ennek olyan oka is volt, hogy a rekombinációs folyamatok elmélete területén végzett korábbi vizsgálataim várhatóan segítséget nyújtottak a rekombinációs doménnek mélyebb megértésében. 1967-ben *V. L. Bonch-Bruevich* professzor meghívására a moszkvai Lomonoszov Egyetem Félvezető Tanszékén foglalkoztam fél évet az instabilitások elméletével.

Hazai vonatkozásban az áraminstabilitások kutatását kezdeményeztem és korábbi munkahelyemen, az MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézetben, e témával foglalkozó kisebb csoportot vezettem. A téma — amely azóta is terebélyesedik — kiterjed az akusztóelektromos jelenségek kutatására is. Jelenleg a Szilárdtestek Kutatása főirány tudományos tervében szereplő feladat.

Értekezésemben a témát érintő legfontosabb eredményeimet ismertetem.

Mielőtt az egyes fejezetek tárgyát összefoglalnám, néhány megjegyzést teszek az értekezés felépítésére vonatkozóan. A vizsgált témakör meglehetősen széles, ezért célszerűnek látszott az elméletek kritikai áttekintését a megfelelő fejezetek előtt megadni, és így csak a kísérleti tényeket foglaltam össze külön részbe. Mivel ennek kapcsán az áraminstabilitásokat röviden osztályozom, természetesen itt néhány olyan területet is érintek, melyben nem értem el említésre méltó eredményt.

Az irodalmi hivatkozásokat fejezetenként csoportosítottam és a formulák számozása is minden fejezetben előlről kezdődik. Nehézséget jelentett annak szigorú betartása — ugyancsak a terület széles volta miatt — hogy egy betű mindig egyazon mennyiséget jelöljön, mert ugyanakkor célszerűnek látszott az adott részterület irodalmának jelöléseit is megtartani. Így pl. az  $\alpha$  mind a forró-elektronok, mind a rekombinációs hullámok tárgyalásánál oly annyira szokásos, hogy új betű bevezetése kényelmetlen lett volna.

Az *I. fejezetben* röviden összefoglaltam (osztályoztam) a különböző áraminstabilitásokat. Két típust különböztetek meg:

- A) a tiszta tértöltési hullámokat (domén-instabilitásokat) és
- B) a kvázi-semleges koncentráció-hullámokat.

A nagyságrendek érzékeltetése céljából röviden összefoglaltam a legfontosabb kísérleti tényeket. Ebben a fejezetben ismertetem a tárgyalás alapjául szolgáló fenomenológikus elmélet alapegyenleteit is.



A II. fejezetben a domén-instabilitás elméletének rövid, kritikai áttekintése után, új módszert mutatok be a stacioneren mozgó nagy térerősségű domének tárgyalására, mely lehetőséget ad a domén-sebesség ( $u_0$ ) és a domén mozgás alatt folyó ( $j_s$ ) áram meghatározására, a domén alakjának ismeretében (doménalak-paraméterek módszere: DAP-módszer). A módszer segítségével levezetett kifejezésekből speciális esetként kiadódnak a korábbi elméletek vonatkozó eredményei, másrészt először mutatok rá a domén aszimmetriájának szerepére. Először mutatom meg, hogy a negatív-differenciális-vezetőképesség (NDV) kinetikájának elhanyagolása egyenértékű a domén alakjának elhanyagolásával.

A módszert alkalmazom a rekombinációs- és Gunn-doménekre csapdák jelenlétében, és anélkül, valamint vizsgálom a Gunn-domének és a rekombinációs domének analógiájának egy lényeges korlátját: a rekombinációs domének esetén a rekombináció kinetikáját leíró egyenleteket *koncentrációkban* sem lehet mindig linearizálni.

A III. fejezetben néhány konkrét esetre alkalmazom az előző fejezet eredményeit.

A rézzel kompenzált GaAs-re Sacks és Milnes által végzett számítógépes vizsgálatok alapján megmutatom, hogy a DAP-ek mind a  $j_s$  áramban, mind az  $u_0$  sebességben lényeges járulékot adnak.

A Gunn-doménéknél, ahol a csapdák nélküli esetben a DAP-ek nem játszanak lényeges szerepet, a diffúzió térfüggésének hatását vizsgálom.

Részletesen elemzem az arannyal kompenzált Ge-ban mozgó lassú domének sebességét. Megmutatom, hogy a DAP-módszer segítségével nem csak az  $u_0$  és  $j_s$  különböző feszültség-függésére adódik természetes magyarázat, hanem  $u_0$  helyes nagyságrendje is meghatározható. Végül röviden vizsgálom a Gunn-domének mozgását csapdák jelenlétében, kompenzált GaAs-ben.

A IV. fejezetben Bonch-Bruевич által felvetett kérdésre válaszolok: a Gunn-domének és a rekombinációs domének külső perturbáció hatására akkor viselkednek hasonlóan, ha a NDV kialakulását leíró kinetikai egyenleteket explicite figyelembe vesszük (vagy mindkét esetben elhanyagoljuk). Ekkor mód van a domének modulálására (illetve mindkét rendszer tisztán relaxációs módon viselkedik).

Az V. fejezet fő célkitűzése olyan, eddig nem vizsgált modell bemutatása, amely negatív-differenciális-vezetőképességet eredményez. Ennek érdekében először a Glaenger-Jordan-féle rekombinációs modellt megjavítva a Shockley-Read-Hall modell korrekt általánosítását adtam meg diszlokációkra. Ezt követi a „forró-elektronok” befogási paraméterének meghatározása diszlokációkon és a mozgékonyaság térfüggésének vizsgálata.

Megmutatom, hogy NDV várható a fotovezetésben akkor, ha a forró-elektronok effektív hőmérséklettel írhatók le.

A VI. fejezetben, felhasználva a S—R—H modell előző fejezetben megadott kifejezését, megmutatom, hogy mind Ge-ban, mind Si-ben mód van kvázi-neutrális rekombinációs hullámok gerjesztésére diszlokációkkal, mint mély centrumokkal.

A VII. fejezetben egy kérdés rövid diszkussziója után összefoglalom az értekezés főbb eredményeit és néhány javaslatot tesz kísérletek elvégzésére. A teljesség kedvéért említek olyan javaslatokat is, melyeket korábban már realizáltunk, s amelyek részletes tárgyalására az értekezésben nem tértem ki.



## I. AZ ÁRAMINSTABILITÁSOK ÁTTEKINTÉSE

### I. 1. A kísérleti tények rövid ismertetése

1964-ben a párizsi félvezető konferencián elhangzott összefoglaló előadásban M. Glicksman a következő három csoportba sorolta az áraminstabilitásokat: igazolt („verified”); megfigyelt („observed”) és megjósolt („predicted”) instabilitások. Ma már lényegesen könnyebb a helyzet. Az elmúlt évtizedben ugyanis igen sok kísérleti és elméleti vizsgálat gyűlt össze, amelyek bemutatására az időrendi felsoroláson túlmenően több lehetőség is kínálkozik. Az újabb elméletek tükrében látszólag különböző jelenségek azonosan szemlélhetők, célszerűbb tehát fizikai szempontot választani a rendezés alapjaként.

A kísérleti megfigyelések és az elméleti interpretációk elemzése alapján az áraminstabilitások következő két típusát különböztetem meg: a domén-instabilitásokat vagy tiszta tértöltési hullámokat és a kvázi-neutrális koncentráció hullámokat.

A) *Domén-instabilitások (tiszta tértöltési hullámok)* A rendszer áram-feszültség karakterisztikájában negatív differenciális vezetőképesség, vagy jelentős nem linearitás van. Ide tartoznak: a rekombinációs domének; a Gunn-domének; az akusztóelektromos-domének; az áramszálak vagy más vezetései együttható nemlinearitásából eredő domenizálódás.

B) *Kvázi-neutrális koncentráció hullámok*

Lényegében lineáris áram-feszültség karakterisztika a kinetikus együtthatók közel állandó értéke mellett. Ide tartoznak: a rekombinációs hullámok, a mágneses térben keletkező helical-instabilitás, stb.

A következőkben instabilitáson mindig egy nem egyensúlyban levő disszipatív rendszer azon tulajdonságát értjük, hogy meghatározott külső feltételek mellett bizonyos típusú fluktuációk növekednek, függetlenül attól, hogy a növekvő fluktuációk egy új, az előző stacioner állapottól lényegesen eltérő stabil állapotba viszik-e a rendszert, vagy tényleges katasztrófa következik be. E megfogalmazás alapján pl. a jólismert fázisátalakulásokat nem tekintjük a fenti értelemben instabilitásnak, mert a fázisátalakulás fenntartásához nem kell állandó külső erő, állandó külső generáció.

Az A. és B. pontokban felsorolt instabilitások esetén viszont a nem-egyensúlyi stacioner állapot fenntartásához állandó külső erő, általában elektromos tér szükséges és ebben az állapotban kell vizsgálni a tértöltési, vagy kvázi-semleges koncentráció hullámok növekedésének feltételeit és az esetleges új végállapot stabilitását, tulajdonságait.

A kérdéskör valójában sokkal általánosabb, mint az az első pillanatra látszik, és ahogy gyakran lenni szokott, különböző területeken azonos időben fogalmazódtak meg és „oldódtak” meg a problémák. A fluktuációk növekedése, a stacioner nem-egyensúlyi állapotok stabilitásának problémái a kémiai reakciók, a biológiai folyamatok területén is megfogalmazódtak és lényegében azonos matematikai módszerek segítségével tárgyalhatók.

Az irreverzibilis termodinamika alkalmazásának lehetősége az egyensúlytól távoli rendszerek vizsgálatára kézenfekvőnek látszott és a domének egzisztenciájának „bizonyítására” B. K. Ridley éppen a minimális entrópia-produkció elvét alkalmazta ma már klasszikusnak tekintett munkájában [1.1].

A másik területen I. Prigogine és munkatársai a nem-egyensúlyi termodinamika általánosítását tűzték ki célul a „disszipatív struktúrák” stabilitásának meghatáro-



zására [1.2]. E kérdésekkel — röviden — a VII. fejezetben foglalkozom, ahol a diszkusszió során megindokolom, hogy a nem-lineáris jelenségek irreverzibilis termodinamikai elmélete jelenlegi szintje mellett, miért helyesebb a fenomenológikus egyenletek közvetlen analízise.

Az a tény, hogy makroszkópikus egyenleteket használunk a fluktuációk növekedésének és az új stacioner állapot leírására (ha ilyen állapot adott esetben egzisztál egyáltalán) feltételezi, hogy az egész folyamat során léteznek a vezetési együtthatók, tehát a fluktuációk karakterisztikus méretei és időállandói nagyobbak, mint a töltéshordozók szabad úthossza és relaxációs ideje. A fenti feltételezést, más szóval a lokális elmélet érvényességét *Bonch-Bruevich* és *munkatársai* vizsgálták ([1.3] IX. fejezet) és megmutatták, hogy igen általános feltételek mellett a vezetési együtthatókat a lokális térerősség függvényeként lehet tekinteni.

Most röviden összefoglalom azokat a legfontosabb kísérleti tapasztalatokat, amelyekről az elméletnek számot kell tudni adni.

### A. Domén-instabilitások (tiszta tértöltési hullámok)

#### A—1. Rekombinációs domének

Az 1960-as évek elején több szerző — egymástól függetlenül — azt a meglepő jelenséget tapasztalta, hogy bizonyos típusú rekombinációs centrumokat tartalmazó félvezetőben, a mintán átfolyó áram, az alkalmazott feszültség egy kritikus értékénél hirtelen csökkenni kezd, majd beáll egy alacsonyabb értékre. Ez az alacsonyabb érték később visszaáll az eredeti szintre és ez a folyamat periódikusan ismétlődik: a külső körben az áram oszcillál. Anélkül, hogy teljességre törekednék, az I. 1. Táblázatban felsorolok néhány szerzőt, akik a fenti jelenséget tapasztalták, illetve részletesen vizsgálták.

A vizsgálatok a következő lényeges tulajdonságokat derítették fel:

- a) A mintában az áram csökkenésével egyidőben egy nagy térerősségű tartomány (domén) alakul ki, amely n-típusú anyag esetén a katódtól az anód felé halad, méreteinek és sebességének észrevehető változása nélkül. A domén  $100\text{--}500\text{ }\mu\text{m}$  nagyságú.
- b) A domén kialakulása előtt az áram-feszültség karakterisztikában egy ún. N-alakú negatív differenciális vezetőképességű szakasz figyelhető meg. A vizsgált esetek nagy részében ezt kapcsolatba lehetett hozni az elektronokra nézve taszító töltéssel rendelkező rekombinációs centrumok jelenlétével.
- c) A domén a mintán való áthaladás idejéhez képest rövid idő alatt alakul ki és utána állandó sebességgel halad.
- d) Az  $u_0$  domén-sebesség, amely a fenti feltételek mellett meghatározza az oszcilláció frekvenciáját a külső körben:  $f = |u_0|/L$ , ahol  $L$  a minta hossza, érzékeny a hőmérsékletre, az alkalmazott feszültségre és a megvilágításra. Értéke, mint a Táblázatból kitűnik  $10^{-4}\text{--}10^{+3}\text{ cmsec}^{-1}$  között, széles tartományban változik.
- e) A stacioner domén-mozgás alatt folyó  $j_s$  áram és az  $u_0$  domén-sebesség között  $|u_0| = k j_s$  kapcsolat van, ahol a  $k$  arányossági tényező függ a mintára kapcsolt feszültségtől, de független a hőmérséklettől és jó közelítéssel a megvilágítástól is.



A fenti néhány tulajdonság nem meríti ki a rekombinációs domének összes jellegzetességét, de az elmélet számára megadja a szükséges kiinduló pontot.

Az instabilitások osztályozása szempontjából az *a)* tulajdonság a leglényegesebb. A tértöltési hullám elnevezést az indokolja, hogy a domén mentén a térerősség gradiense jelentősen különbözik zérustól, tehát a minta ezen szakaszában a tértöltés igen nagy.

A negatív differenciális vezetőképesség létezésével a domén-instabilitás kísérleti kimutatása előtt is foglalkoztak. *Ridley és Watkins* [1.13] még 1961-ben megállapították, hogy  $d\sigma/dE < 0$  esetén a vizsgált rendszer nem lesz stabilis, de kísérletileg csak 1963-ban sikerült a NDV és az áram-oszcilláció tudatos megfigyelése. Ezzel megindult a kutatás a különböző NDV-hez vezető modellek kidolgozása irányába.

I. 1. TÁBLÁZAT

Szerzők	Anyag	Centrum	Hőm. K	$E_{cr}$ V/cm	$u_0$ cm/sec	Ref.
Ridley és Pratt	Ge	Au	20	20—50	$10^{-2} - 1$	I. 4
Kurova et al.	Ge	Au	20—40	10—100	$10^{-2} - 10^{-3}$	I. 5
Barraud	GaAs	?	300	$> 800$	$\sim 0,2$	I. 6
Böer et al.	CdS	Cu, Ag	300	$10^3$	$10^{-4} - 20$	I. 7
Kalashnikov et. al.	Ge	Cu	20—100	20—100	$10^{-3} - 10^3$	I. 8
Sviszt és Schanda	ZnS	?	300	$10^3$	0,1	I. 9
Wisbey és Ridley	Ge	Pt	25—77	10—100	?	I. 10
Germanova et al.	CdS	?	200	$10^3 - 10^4$	$10^{-4} - 10^{-1}$	I. 11
Sacks és Milnes	GaAs	Cu	170	800	2—300	I. 12

#### A—2. Gunn-domének (drift-instabilitás)

1963-ban publikálta *J. B. Gunn* azt a nevezetes megfigyelését [1.14], hogy ha viszonylag tiszta GaAs mintára kapcsolt feszültség meghalad egy kritikus értéket, akkor az áramkörben igen nagyfrekvenciás (néhány GHz-es) áram-oszcilláció lép fel. Mivel a szükséges térerősség lényegesen nagyobb a rekombinációs instabilitásnál fellépő értékeknél, a kísérleteket általában impulzus üzemben végezték. A különböző feltételek mellett végzett kísérletek mutatták, hogy a jelenség sok vonatkozásban a rekombinációs doménekre emlékeztet, de a nagyságrendekben jelentős különbségek vannak. A legfontosabb tulajdonságok:

- a)* Az áramoszcilláció jellege a rekombinációs doménekéhez hasonló. A domén kialakulása most is megfigyelhető, méretük 10—100  $\mu\text{m}$ .



- b) A NDV az áram-feszültség karakterisztikában megfigyelhető  $E_{cr} \approx 3 \cdot 10^3$  V/cm érték körüli tartományban. Ez a karakterisztika nem a vezetési sávban levő elektronok koncentráció változásával, hanem az effektív mozgékonyság térfüggésével hozható kapcsolatba. Innen származik a driftinstabilitás elnevezés.
- c) A domén kialakulásának ideje most is kisebb a doménnek a mintán való áthaladási idejéhez képest (hosszú minta!).
- d) A domén-sebesség csak gyengén függ a hőmérséklettől, a megvilágítástól, stb. és értéke  $\approx 2 \cdot 10^7$  cm/sec. A domén változatlan sebességgel és alakkal halad a katódtól az anód felé, ha a minta eredetileg homogén volt.

Már az első pillanatban világos volt, hogy az effektus olyan alkalmazási lehetőséget rejt magában, amely a mikrohullámú generátorok eddig nem remélt egyszerűsítésére ad módot: egyetlen ohmos kontaktusokkal ellátott félvezető minta!

A fizikai érdekességen túlmenően, ez indokolta azt a lázas elméleti és kísérleti kutató munkát, amely *Gunn* felfedezését követte. Ehhez hozzáfűzöm, hogy *Gunn*

1.2 TÁBLÁZAT

Szerzők	Anyag	Hőm. K	$E_{cr}$ V/cm	$u_0$ cm/sec	Megjegyzés	Ref.
Gunn	GaAs	300	$3,2 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^7$		I. 14
Foyt és McWhorter	In As	300	$1,4 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^7$	egytengelyű nyomás (111) mentén $2 \cdot 10^4$ kg/cm <sup>2</sup>	I. 16
McGroddy Nathan	Ge	30	$1,8 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^7$	$T \approx 120$ K; $\langle 100 \rangle$ , vagy $\langle 110 \rangle$ irányban tér	I. 17
Kastalski és Ryvkin	Ge	20	5	$3 \cdot 10^5$	$T < 30$ K; $n < 5 \cdot 10^3$ cm <sup>-3</sup> $E \parallel \langle 111 \rangle$	I. 18
Ludwig és Aven	ZnSe	300	$40 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^7$	—	I. 19
C. Hilsum et al.	InP	300	$5 - 8 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^7$	három-nívós modell	I. 20

első dolgozatában nem találta meg az általa megfigyelt áram-oszcilláció helyes magyarázatát. Egy hibás becslés miatt elvetette a Ridley-Watkins-Hilsum modellt. A megoldásra a Gunn-effektussal kapcsolatban elsőnek *H. Kroemer* mutatott rá [1.15]. Az 1.2. Táblázatban felsorolok néhány anyagot, amelyeken a Gunn-effektust észlelték, s amelyek minden vonatkozásban igazolták az említett modellt.

Ennek lényege, hogy a GaAs vezetési sávjának  $k = (0, 0, 0)$  körüli, központi völgyében levő elektronjai a térerősség hatására átmennek az energetikailag magasabb minimumokba (az  $\langle 1, 0, 0 \rangle$  iránnyal ekvivalens irányokról van szó),



ahol az effektív tömegük lényegesen nagyobb és így mozgékonyaságuk lényegesen kisebb, mint a központi völgyben. Ezzel a vezetési elektronok átlagos mozgékonyasága csökken, ami negatív differenciális vezetőképességet eredményez. Mint az előzőekben említettem, ez szükséges feltétele a tértöltési hullámok keletkezésének.

### A—3. Akusztóelektromos domének

Az akusztóelektromos domének kísérleti megfigyelését megelőzte az akusztikus hullámok erősítésének felfedezése. Ebben a vonatkozásban is eltérés van a Gunn-doménekhez képest, ahol az elektromágneses hullámok erősítését csak a doménmódus vizsgálata után dolgozták ki. Mint látni fogjuk, a különbség ennél lényegesen mélyebb. A deformációs potenciál által létrehozott elektron-fonon kölcsönhatás beható vizsgálata azt mutatta (*Weinreich és munkatársai* [1.21]), hogy Ge-ban, a megfelelő irányban haladó rugalmas hullámok erősíthetők, ha az elektronok driftsebessége meghaladja a hangsebességet. Az effektus lényeges feltétele, hogy az elektronok a hanghullám periódusának megfelelően képesek legyenek csomókba rendeződni („bunching effect”). Az így kialakult töltéshordozó hullám és a hanghullám fázisviszonya dönti el, hogy erősítés vagy csillapítás jön-e létre. A deformációs potenciál olyan gyenge kölcsönhatást ad, hogy az elektronok elektrosztatikus taszítása általában megakadályozza a „csomósodást”. Lényegesen más a helyzet a piezoelektromos kölcsönhatás esetén, amely mintegy  $10^{11}$  Hz-ig, több nagyságrenddel erősebb kölcsönhatást jelent, mint a deformációs potenciál.

Röviddel *Nine* [1.22] megfigyelése után, amelyben az akusztikus hullámok csillapodását észlelte megvilágított CdS-ban, *Hutson és munkatársai* a fordított effektust is kimutatták [1.23]: megvilágított és fotovezetést mutató CdS-ban, elegendő nagy elektromos térnél, a minta piezoelektromosan aktív irányában haladó longitudinális hullámok, vagy az arra merőlegesen haladó tranzverzális hullámok erősíthetők voltak.

Az akusztóelektromos effektus az áram-feszültség karakterisztikában is meg nyilvánul. *Smith* [1.24] a karakterisztika telítését figyelte meg.

1.3 TÁBLÁZAT

Szerzők	Anyag	Hőm. K	$E_{cr}$ V/cm	Orientáció E:	$v_a \times 10^6$ cm/sec	Ref.
Sliva és Bray	GaSb	77	700	$\parallel \langle 110 \rangle$	2,8	I. 25
Haydl és Quate	CdS	300	700	c-tengely	1,75	I. 26
Quentin és Thuillier	Te	77	30	$\parallel \langle 100 \rangle$	1,6	I. 27
Meyer és Jorgensen	ZnO	77	600	c-tengely	2,7	I. 28
Hervouet et al.	GaAs	77	280	$\parallel \langle 110 \rangle$	3,5	I. 29
Aoki et al.	InSb	77	20	$\parallel \langle 110 \rangle$	2,3	I. 30



A doménekre vonatkozó kísérleti megfigyelések, amelyeket ma már számos  $A^3B^5$  és  $A^2B^6$  félvezetőre elvégeztek (lásd az I.3 Táblázat) az alábbi fontosabb tényeket eredményezték:

- Az áram-feszültség karakterisztika nem-lineáris (telítési) szakaszt mutat. A külső körben folyó áram a nem-lineáris szakaszt elérve oszcillálni kezd, mely egy nagy térerősségű domén mozgásától származik. Ugyanebben a tartományban az akusztikus fluxusnak is maximuma van. A domén szélessége 100–200  $\mu\text{m}$ .
- Az áram-feszültség karakterisztika telítődése és az oszcilláció  $E_k \approx c_s/\mu$  értéknél lép fel, ahol  $c_s$  a hang sebessége,  $\mu$  a töltéshordozók mozgékony-sága. A karakterisztika telítődése az akusztóelektromos erősítéssel hozható kapcsolatba.
- Az oszcilláció  $T$  periódusában (a rekombinációs és Gunn-doménekkel ellentétben) a domén áthaladási ideje  $T_{tr}$  mellett azonos szerepet kap az ún.  $T_i$  inkubációs idő is, mely a kellő mennyiségű fonon kialakulásához szükséges, pl. a termikus fluktuációk erősítése révén (lásd pl. [I.31]). Vagyis:  $T = T_{tr} + T_i$ .
- A változatlan alakkal haladó domén sebessége, ha nincsenek az anyagban csapdák, megegyezik a hang sebességével:  $|u_0| \approx c_s \approx 5 \cdot 10^5 \text{ cm/sec}$ .

Két kérdést kell még kissé részletesebben vizsgálni, mert csak így érthető, hogy miért bonyolultabb az akusztóelektromos instabilitás tárgyalása, mint akár a Gunn-effektusé, akár a rekombinációs doméneké.

Az egyik probléma viszonylag egyszerű. Világos, hogy az akusztikus hullámok hullámhossza, vagy célszerűen a  $q$  hullámszáma és a töltéshordozók szabad úthosszának viszonya meghatározza a tárgyalás jellegét. Ha  $ql \ll 1$ , akkor nyilván az akusztikus hullám kiterjedésén belül beszélhetünk a vezetési együtthatók lokális értékéről, és használhatjuk a fenomenológikus egyenleteket. A  $ql \gg 1$  feltétel teljesülése esetén kvantummechanikai tárgyalás szükséges, mert az elektronok külön-külön „érezik” a hullámteret és nem lehet egyszerűen a hullámhosszra vonatkoztatott átlagokkal számolni.

A második kérdés — mely sok tekintetben ma is nyitott — a domén instabilitás és a NDV kapcsolatára vonatkozik. Az A—1. és A—2. esetekben a domén kialakulását mindig megelőzte a NDV fellépte. Vajon az akusztóelektromos domének esetén is van NDV, vagy elképzelhető domén-instabilitás (mérhető) NDV nélkül is? A válasz a  $T_i$  inkubációs idő és a Maxwell-féle relaxációs idő  $\tau_M$  viszonyától függ. Most ugyanis a mozgékony-ság csökkenésének feltétele nincs eleve adva a rendszerben, mint pl. a Gunn-effektus esetén, hanem a részben független dinamikai rendszer a nem-egyensúlyi fononok számától függ. Amíg az akusztikus fluxus nem nő meg egy megfelelő szintre, addig nem várható az elektron-mozgékony-ság lényeges csökkenése, nem várható NDV fellépése. Mivel számos piezoelektromos anyagban a töltéshordozók koncentrációja elég nagy, a  $T_i < \tau_M$  feltétel nem teljesül (lásd pl. félvezető CdS, GaAs, stb.), és ilyenkor a fonon-rendszer előbb kerülhet inhomogén állapotba (tisztá akusztikus domén), még mielőtt a NDV megjelenéséről beszélhetnénk. E kérdésnek részletes irodalma van. Így pl. *Bonch-Bruevich, Gulyaev és munkatársai* [I.3], [I.32] stacioner hanghullám jelenlétében több lehetőséget vizsgáltak meg, melyek módot nyújtanak a NDV fellépéséhez.



## A—4. Áramszálak

A dielektrikumok letörése a szilárdtestfizika klasszikus területe, amely évtizedekkel megelőzte a forró-elektron vizsgálatokat. Már ezeknél a kísérleteknél észrevették, hogy a letörés mindig egy vékony csatorna mentén következik be, függetlenül a kontaktusok átmérőjétől. Ennek a ténynek modellszerű megfogalmazását *Wagner* adta meg még 1932-ben. Ugyancsak ő dolgozta ki a tisztán termikus letörés stacioner elméletét. E kérdések összefoglalásával itt nem foglalkozom, részletesebben ismeretetés az [I.33]—[I.37] munkákban található. A letörést megelőző ún. *S*-alakú áram-feszültség karakterisztikát rendszerint sikerült megfigyelni, de csak *Ridley* klasszikus vizsgálata óta ismeretes, hogy a negatív differenciális vezetőképesség (NDV) akár *N*-alakú, akár *S*-alakú karakterisztikáról van szó, egységesen kezelhető: a különbség csak abban áll, hogy *N*-alakú áram-feszültség karakterisztika esetén nagy térerősségű domén keletkezik, míg *S*-alakú karakterisztika esetén az áram-eloszlás válik

I. 4. TÁBLÁZAT

Szerzők	Anyag	Hőm. K	Megjegyzés	Ref.
pl. W. Franz	dielektrikumok	—	termikus és térerősség által indukált áramszálak	I. 33. I. 34.
Ancker—Johnson	InSb	77	„magneto-thermal pinch” effektus, térfogati áramszál	I. 35.
Bok	InSb	20	elektronok túlhevítése: mozgékonyság növekedés	I. 38.
McWhorter és Rediker	Ge	4	„Cryosar”: sekély nívójú szennyezések ütközési ionizációja	I. 39.
Somogyi	GaP	100	<i>S</i> -alakú karakterisztika mély nívók kiürülése	I. 40.
Pataki és Henk	Ge, Si	300	termikus letörés, felületi áramszál	I. 41.
Berglund	VO <sub>2</sub>	300	félvezető-fém átalakulás (termikus hatás)	I. 42.
Ashley és Milnes	Ge	77	Au-val kompenzált Ge, p-i-n dióda <i>S</i> -karakterisztikát mutat	I. 43.

inhomogénné a minta keresztmetszete mentén. Ha a szokásos képen gondolkodunk, akkor az árameloszlás „doménizálódását” az áramra merőleges irányú fluktuációk növekedése okozza, míg az árammal párhuzamos tértöltés-fluktuációk igen gyorsan elhalnak.

Az áramszálak kísérleti vizsgálatának lényeges problémája a stacioner állapot megvalósítása. A termikus, vagy ütközéses ionizáció által létrehozott *S*-alakú karakterisztikák esetén, általában „katasztrófális” változás következik be a rendszerben:



anyag-megolvadás, kontaktusok tönkremenetele, stb. Megfelelő mérési technikával az  $S$ -alakú karakterisztika jelentős része kimérhető, azonban inhomogén árameloszlás csak impulzus üzemmódban vizsgálható. Lényegesen más a helyzet, ha az  $S$ -karakterisztika az elektron-gáz transzport tulajdonságaival kapcsolatos és a hő-elvezetés csak másodlagos szerepet kap. Az ún. „túlhevítéses mechanizmusoknál” az elektronok szóródása csökken, ha növekszik az elektromos tér, azaz ha energiájuk növekszik. Pontosabban két folyamatot kell vizsgálni: az elektronok impulzusának és energiájának relaxációját, növekvő elektromos térben. Elsőnek *J. Bok* [I.38] mutatott rá arra, hogy InSb-ban az általa megfigyelt negatív karakterisztika a szennyező ionokon való szóródás csökkenéséből származik. Az I.4. Táblázatban néhány példát mutatok be az  $S$ -alaku áram-feszültség karakterisztika és az áramszálak kísérleti megfigyelésére vonatkozóan. A jelen rövid áttekintés keretében nincs mód részletezni a Táblázatban felsorolt  $S$ -alakú karakterisztikák, áramszálak tulajdonságait. A megjegyzés oszlopban foglaltak tájékoztatást adnak az  $S$ -alakú karakterisztika eredetéről. Látható — hogy függetlenül attól — hogy milyen anyagról vagy mechanizmusról van szó, mindig a „letörésnek” egy fajtájával állunk szemben, amelyben a vezetőképeség nem-lineáris növekedése következik be. A fenti terület gyakorlati szempontból is rendkívül érdekes. A világító áramszálakról az [I.44] munkában részletes összefoglalás található.

### B. Kvázi-neutrális töltéshordozó hullámok

A különböző előjelű töltéssel rendelkező *mozgó* töltéshordozók rendszere sok vonatkozásban hasonlóan viselkedik a gáz-plazmákhoz. Az analógia lényegesen mélyebb, mint ahogy az első pillanatra látszik, akár a transzport tulajdonságok mikroszkópikus elméletére, akár az elektromágneses hullámok terjedési viszonyaira, vagy a plazma-fizikában jól ismert instabilitásokra gondolunk. A „szilárdtest—plazmák” fontosabb tulajdonságairól és alkalmazási lehetőségeiről az [I.45] összefoglaló dolgozatban részletesen írtam. Most, értekezésem szempontjából lényeges körülményre mutatok rá, hogy a gázplazmák elméletében és kísérleti vizsgálatában szinte „készen kaphatók” azok a jelenségek, amelyek a szilárdtestplazmákban felépnek. Természetesen az egyes mennyiségek nagyságrendje a szilárdtest és a fonon-gáz jelenléte miatt különböző, de a matematikai tárgyalás, a hidrodinamikai közelítés alkalmazhatósága, sok hasonlóságot eredményez. Ez a hasonlóság nyilvánul meg abban is, hogy félvezetőkben is van mód „kvázi-semleges” töltéshordozó hullámok kialakulására, mind mágneses tér jelenléte nélkül, mind mágneses térben. A kvázi-neutralitás természetesen csak közelítést jelent és elsősorban annak kiemelésére hivatott, hogy olyan effektusokról van szó, ahol a tértöltés nem játszik meghatározó szerepet.

Az alábbiakban röviden ismertetem ezeket a jelenségeket, amelyek a domén-instabilitás mellett egy újabb, igen széles területet jelentenek a mai áraminstabilitás kutatásokban.

#### B—1. Rekombinációs hullámok

*Holonyak* és *Bevacqua* 1963-ban, arannyal kompenzált szilícium mintában, a minta megvilágítása esetén oszcillációt figyeltek meg, amelyet nem lehetett sem domén-instabilitással, sem más addig ismert modellel értelmezni [I.46]. A kísérletek szerint az áram-feszültség karakterisztika pozitív szakaszán lépett fel az instabilitás, ha



fénnyel (vagy injektáló kontaktusokkal) nem-egyensúlyi elektronokat és lyukakat vittek a rendszerbe. E kísérleti munkából indultak ki *Konstantinov* és *Perel* [I.47], amikor megmutatták, hogy a tilos sávban mélyen fekvő rekombinációs nívók jelenlétében, bizonyos feltételek teljesülése esetében (lásd alább) mód van a

$$\delta n \approx \delta p \sim e^{i(kx - \omega t)}$$

alakú kvázi-neutrális töltéshordozó hullámok növekedésére. A számítás arra a meglepő eredményre vezetett, hogy negatív differenciális vezetőképesség nélkül, tehát az áram-feszültség karakterisztika pozitív szakaszán is keletkezhetnek ilyen hullámok, ha az alábbi feltételek teljesülnek:

- Az elektronok és lyukak egymástól független rekombinációja, lényegesen különböző befogási frekvenciákkal (reciprok élettartamokkal) pl.  $v_p \gg v_n$ ;
- Elegendő nagy egyensúlyi lyuk-koncentráció az elektronok mellett, azaz egy n-típusú anyagban, ahol  $n_0 \gg p_0$ , a dimenziótlan  $\alpha = p_0 v_p / n_0 v_n$  paraméternek egynél nagyobb értékűnek kell lenni.
- Olyan nagy külső elektromos tér, hogy a lyukak drift-hosszúsága nagyobb legyen a diffúziós hosszánál.

Az instabilitás keletkezésének a fizikai modellje a következő. Tegyük fel, hogy a minta valamelyik tartományában, a véletlenszerű fluktuációk hatására, megnövekszik a többségi töltéshordozók koncentrációja, a fenti feltételek mellett az elektron koncentráció. Ezt a tértöltést a rendszer gyorsan neutralizálni fogja, éspedig a lyukak gyors befogásán keresztül (feltettük, hogy  $v_p \gg v_n$ ). Kialakul tehát egy kvázi-semleges töltés csomag, amelynek egyik komponense a mély nívókon van lokalizálva. Mivel az elektronok csak lassan fogódnak be, a töltés csomag szétszóródása (a diffúziót elhanyagolva egy pillanatra) csak lassan fog bekövetkezni. Van idő tehát arra, hogy a külső elektromos tér az elektronokat és lyukakat kissé szétválassza: Ennek hatására egy kis „völgy” keletkezik a térerősség eloszlásban.

A diffúzió elhanyagolása és a lyukak végtelen gyors befogódásának feltételezése mellett belátható, hogy a perturbáció a többségi töltéshordozók — most az elektronok

1.5 TÁBLÁZAT

Szerzők	Anyag	Centrum	Hőmérséklet K	$E_{cr}$ V/cm	Ref.
Holonyak és Bevacqua	n-Si	Au, Cr	300	$\sim 200$	I. 46.
Karpova, Kalashnikov et al.	n-Ge	Mn	290—320	$\sim 20$	I. 48.
Kornilov és Zavadsky	n-Si	Zn	250—350	$6 \cdot 10^2 - 40$	I. 49.
Streetman et al.	Si	sugárzási hibák	250	—	I. 50.
Viehmann	GaAs	Cr, és oxigén	300	$> 200$	I. 51.
Marinova	CdS	?	300	$10^2 - 8 \cdot 10^2$	I. 52.



— mozgási irányában fog haladni, miközben az amplitúdó növekszik. A veszteségek figyelembevételével végül is egy stacionerén haladó hullám jön létre. A pontos elmélet, amelyet az általam javasolt modellen fogok végigszámolni, megadja a fluktuációk növekedésének pontos feltételét.

Az elmélet megfogalmazása idején *Konstantinov* és *Perel* nem tudták az elméletüket kísérleti tényekkel kielégítően összevetni, mivel *Holonyak* és *Bevacqua* erősen kompenzált Si-ában nem volt pontosan ismert a centrumok állapota és maga az elmélet is több egyszerűsítéssel élt.

Ma már több olyan kísérleti vizsgálat ismert, ahol a rekombinációs hullámok létezése egyértelműen bizonyított.

Az I.5. Táblázatban néhány kísérleti munkát sorolok fel, melyek mutatják, hogy az elektron-lyuk-gáz hidrodinamikai instabilitása számos félvezetőben, a legkülönbözőbb rekombinációs centrum jelenlétében megfigyelhető.

## B—2. Helical-instabilitás (Oscillisztor)

Véletlen megfigyelés vezetett a „helical” (spirál) instabilitás felfedezéséhez. Az injektáló kontaktusok szisztematikus vizsgálata közben *Ivanov* és *Ryvkin* [I.53] a következő jelenséget figyelték meg: ha egy n-típusú germánium rudat, amelynek egyik végét injektáló kontaktussal láttak el, a hossz tengellyel párhuzamos mágneses térbe helyezték, akkor az elektromos és mágneses tér egy kritikus értéke felett a külső körben folyó áram oszcillálni kezd. Később, *Larrabee* és *Steele* [I.54], a fenti jelenségen alapuló félvezető eszközt „Oscillistor”-nak nevezték el. Az effektus magyarázatát — egymástól függetlenül — *Glicksman*, illetve *Gurevich* és *Ioffe* találták meg [I.55], [I.56]. Felismerték, hogy itt az elektron-lyuk gáz plazma-szerű viselkedéséről van szó és így az elméleti leírásnál alkalmazni tudták a gáz-plazmákban fellépő hasonló instabilitás modelljét [I.57]. Ennek alapján az oszcillisztor hatás lényege, hogy az elektron-lyuk gázban mód van a spirál-alakú kvázi-neutrális koncentráció hullámok növekedésére. Pontosabban, pl. egy henger alakú mintában a

$$\delta n \approx \delta p = f(r, z) e^{i(kz + \omega t + m\Phi)}$$

$$\delta E = g(r, z) e^{i(kz + \omega t + m\Phi)}$$

alakú perturbációk növekedhetnek, ha a  $\Phi$  azimut előtti „ $m$ ” szám zérustól különbözik. Innen ered a spirál, vagy helical jelző. A diszperziós reláció felírása most azért bonyolult, mert az  $r$  szerint átlagolni kell a  $\delta n$ ,  $\delta p$  és  $\delta E$ -ben szereplő  $f(r, z)$  és  $g(r, z)$  függvényeket.

Úgy gondolom, hogy éppen az Oscillisztor kapcsán szükséges néhány megjegyzést tenni a kvázi-neutrális hullámokon alapuló félvezető eszközökre vonatkozóan. Ezekben az eszközökben a kisebbségi töltéshordozók is lényeges szerepet kapnak az instabilitás kialakulásában, ezért azok élettartama (a térfogati és felületi rekombináción keresztül) korlátozza az elérhető frekvenciát és az oszcilláció amplitúdóját. Elsősorban ez akadályozta a fenti eszköz elterjedését is. Az oszcilláció frekvenciája és amplitúdója érzékeny az elektromos és mágneses tér által bezárt szög értékére. *Larrabee* mutatott rá arra [I.54], hogy ha az injektált elektron-lyuk plazmát a minta kis elfordításával az egyik felület közelébe kényszerítjük, akkor új oszcillációs módus jön létre. Az így működő eszközt „one-surface oscillistor”-nak nevezte. Ez a módus létezése adott lehetőséget a „field-effect oscillistor” megvalósítására [I.58], amelyről a VII. fejezetben kissé részletesebben is írok.



Az I.6 Táblázatban a szereplő mennyiségek nagyságrendjének bemutatására, néhány jellegzetes kísérletet foglaltam össze.

A Táblázatban az  $E_{cr}$  értéke nincs feltüntetve a p—Si és az n—InSb esetében, mert a szerzők az áramokat adták meg. Ezek értéke  $\sim 10$  mA, illetve  $\sim 2$  mA.

1. 6. TÁBLÁZAT

Szerzők	Anyag	Hőm. K	$E_{cr}$ V/cm	$B_{cr}$ kG	$f_{cr}$ Hz	Ref.
Ivanov és Ryvkin	n-Ge	300	50	6—8	50—100	I. 53.
Ando és Glicksman	n-InSb	77	—	0,05	$10^3$	I. 59.
Schulz és Voges	p-Si	77	—	5—10	300	I. 60.

## I. 2. AZ ÁRAMINSTABILITÁSOK FENOMENOLOGIKUS LEÍRÁSÁHOZ SZÜKSÉGES ALAPVETŐ EGYENLETEK

Az előző pontban röviden összefoglalt kísérleti megfigyelések mutatják, hogy melyek azok a lényeges jelenségek, amelyeket az elméletbe bele kell építeni, hogy az instabilitások értelmezésénél helyes kvantitatív összefüggéseket kapjunk.

Ismeretes, hogy a fenomenológikus elmélet olyan makroszkópikus mennyiségekkel operál, mint koncentrációk, térerősség, mozgékonyosság, befogási paraméterek, stb., és ezek között a mérleg-egyenletek adnak összefüggést, kiegészítve az áramok kifejezéseivel, valamint a Poisson-egyenlettel. A felírásra váró egyenletek bonyolultsága a modell bonyolultságától függ és itt bizonyos mértéktartásra van szükség: csak olyan modellekre érdemes felírni az egyenleteket, amelyek valóban lényeges effektusokfelléptéhez vezetnek.

Tegyük fel, hogy a vizsgált, eredetileg homogén rendszer térfogategységében  $N_d$  ionizált donör és  $N_a$  akceptor van jelen és az  $s=0, 1, 2, \dots, M$  töltésállapotokkal rendelkező rekombinációs centrumok koncentrációja  $N_t$ . Ez a modell mind a rekombinációs domének, mind a rekombinációs hullámok alapvető tulajdonságainak megértéséhez elegendő. A másik lényeges tény, hogy a vezetési elektronokat különböző mozgékonyosságú állapotok közötti átmeneteket lényegesen gyorsabbnak tételezzük fel mint a probléma többi karakterisztikus ideje. Ebben az esetben az effektív mozgékonyosság bevezetése lehetséges, ahol a különböző mozgékonyságok súlyozva vannak ezen állapotok betöltési számával.

A másik lehetőség, hogy az átmeneteket explicite figyelembe vegyük. Látjuk majd a Gunn-effektus tárgyalásánál: általában elegendő az egyszerűbb eset vizsgálata, azonban lehetnek olyan jelenségek, melyeknél a völgyek közötti átmenetek figyelembevétele nélkülözhetetlen.

Egy további lényeges tény, hogy a domén-instabilitásoknál általában monopóláris vezetés van, míg a kvázi-neutrális hullámoknál mind az elektronok, mind a lyukak szerepe lényeges. Az elmondottaknak megfelelően az alapegyenleteket a következő összefüggések adják: az elektronokra és lyukakra vonatkozó kontinuitási egyenletek; a rekombináció kinetikáját leíró összefüggések; az áramok fenomenológikus kifejezései (figyelembe véve az elektromos térerősségtől függő  $\mu_n, \mu_p$  mozgékonyságokat és  $D_n, D_p$  diffúziós együtthatókat); valamint a Poisson-egyenlet. Az



egyenleteket CGS—egységekben írjuk fel. Az elektron töltésének abszolút értékét  $q$ -val jelöljük. Néhány további jelölés:  $n, p, n_{ts}$  az elektronok-, a lyukak, és az „ $s$ ”-dik töltésállapotban levő rekombinációs centrumok koncentrációja,  $\mathbf{E}$  — az elektromos térerősség,  $\varepsilon$  a dielektromos állandó,  $\mathbf{j}_n, \mathbf{j}_p$  a megfelelő áramsűrűségek,  $q$ -a tértöltés-sűrűség. E jelölésekkel az alapegyenletek:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{j}_n = - \sum_{s=1}^M U_s^{s-1}(n) \quad (\text{I.1})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{j}_p = - \sum_{s=0}^{M-1} U_s^{s+1}(p) \quad (\text{I.2})$$

$$\mathbf{j}_n = qn\mu_n \mathbf{E} + q \operatorname{grad}(D_n n) \quad (\text{I.2})$$

$$\mathbf{j}_p = qp\mu_p \mathbf{E} - q \operatorname{grad}(D_p p)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \frac{4\pi}{\varepsilon} q (N_d - N_a - n - \sum_{s=0}^M sn_{ts} + p) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} \varrho \quad (\text{I.3})$$

$$\frac{\partial n_{ts}}{\partial t} = U_s^{s-1}(n) + U_s^{s+1}(p) - U_{s+1}^s(n) - U_{s-1}^s(p) \quad (\text{I.4a})$$

$$\sum_{s=0}^M n_{ts} = N_t \quad (\text{I.4b})$$

Az  $U(n)$ , illetve  $U(p)$  tiszta befogási sebességeket a több töltésállapotú centrumokon keresztül történő rekombináció elméletéből lehet venni, megengedve, hogy a befogási paraméterek térerősség függők legyenek. A szerző kandidátusi értekezésében [I.61], [I.62] általánosabb esetre is meg van adva a rekombináció kinetikáját leíró egyenletek alakja, amikor a centrumok gerjesztett állapotokkal is rendelkezhetnek. Elhagyva a gerjesztett állapotokra vonatkozó indexeket, adódik az (I.4) egyenlet, míg az  $U(n)$ ,  $U(p)$  mennyiségekre kapjuk:

$$U_s^{s-1}(n) = C_{n,s}^{s-1} [nn_{t,s-1} f_{n,s}^{s-1}(E) - \Gamma_{n,s}^{s-1} n_{ts}]$$

$$U_s^{s+1}(p) = C_{p,s}^{s+1} [pn_{t,s+1} f_{p,s}^{s+1}(E) - \Gamma_{p,s}^{s+1} n_{ts}] \quad (\text{I.5})$$

$$\Gamma_{n,s}^{s-1} = n_0 n_{t,s-1,0} / n_{ts0}; \quad \Gamma_{p,s}^{s+1} = p_0 n_{t,s+1,0} / n_{ts0}$$

A szükséges általánosítás egyszerű. Azt kell csak feltételezni, hogy a külső tér hatására letöréshez hasonló jelenségek nem lépnek fel, azaz a mély nívókról való emisszió valószínűsége változatlan, míg a befogási paraméterek megváltoznak. Így az  $s-1 \rightarrow s$  elektronbefogás  $C_{n,s}^{s-1}$  paramétere az  $f_{n,s}^{s-1}(E)$  függvénnyel szorozódik és hasonló kifejezés érvényes az  $s+1 \rightarrow s$  lyukbefogás  $C_{p,s}^{s+1}$  paraméterére is. Az (I.1—5) egyenletekben nem vettük figyelembe azt a lehetőséget, hogy a vezetési (vagy vegyérték) sáv több alsávból állhat, ahol a mozgékonyaságok különbözők lehetnek. Ezt az alábbiakban külön tárgyaljuk, mert el akartuk kerülni azt a szük-

\* Az irodalomban gyakori az  $n_{ts}$  ( $s=0, 1, 2, 3, \dots$ ) állapotokban levő centrumok koncentrációjára a következő jelölést használni:  $N_t^0, N_t^-, N_t^+$  stb. A „ $t$ ” index helyébe értelemszerűen a centrum vegyjelét írják.



ségtelen bonyolítást, hogy mindkét alsávból az összes „s”-állapotba való átmenetet figyelembe vegyük, ami általában nem lép fel. Itt csak az egyszerű „két-állapot modell” egyenleteit írjuk fel, amit elsőnek Ridley javasolt [I.63]. Tekintsünk  $n$ -típusú félvezetőt, melynek vezetési sávjában levő elektronjai, vagy a „nagy-mozgékonyságú” alsávban („1”-es index), vagy a „kis-mozgékonyságú” alsávban vannak („2”-es index). További egyszerűsítést jelent, hogy a csapdák hatását is elhanyagoljuk. A jelöléseket annyiban módosítjuk, hogy a tiszta tértöltési hullámokra való tekintettel az  $n_i$  ( $i=1,2$ ) elektron-koncentrációk helyett a  $q_i = qn_i$  töltéssűrűségeket vezetjük be. A következő egyenleteket írhatjuk fel ( $i=1,2$ ):

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} - \operatorname{div} \mathbf{j}_i = (-1)^i \psi_{12}(q_1, q_2, E) \quad (\text{I.6})$$

$$\mathbf{j}_i = q_i \mu_i \mathbf{E} + \operatorname{grad}(D_i q_i) \quad (\text{I.7})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_1 - q_2) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} q \quad (\text{I.8})$$

ahol  $q_0$  a kompenzáló pozitív töltéssűrűség,  $\psi_{12}$  az  $1 \rightleftharpoons 2$  átmenetet leíró tiszta átmeneti sebesség. Ennek konkrét alakja igen egyszerű, mert az  $1 \rightarrow 2$  átmeneteket egy  $\tau_{12} \equiv \tau_r(E)$  térerősségtől függő karakterisztikus idővel jellemezhetjük, míg a  $2 \rightarrow 1$  átmeneteket jellemző  $\tau_{21} \equiv \tau_g$  karakterisztikus idő a tértől függetlennek tekinthető [I.63], [I.64]. Írhatjuk tehát:

$$\psi_{12}(q_1, q_2, E) = \frac{1}{\tau_r(E)} q_1 - \frac{1}{\tau_g} q_2 \quad (\text{I.9})$$

Megjegyzem, hogy (I.9) azért egyszerűbb a lokalizált nívókra történő átmenetek megfelelő kifejezésénél, mert az „1” és „2” állapotokban mindig van elegendő üres hely, míg lokalizált centrumok esetén a betöltött, vagy üres centrumok koncentrációja zérus is lehet. Az (I.6—9) egyenletek általánosítása a csapdák figyelembevételével a későbbiekben történik meg.

Mielőtt a konkrét problémák elemzésébe fognánk, két kérdést kell röviden érinteni. Az egyik a  $q$  tértöltés-sűrűségre vonatkozó mérleg-egyenlet kérdése, a másik a határfeltételek vizsgálata.

A  $p$  koncentrációra vonatkozó kontinuitási egyenletből vonjuk ki az  $n$ -re vonatkozót, valamint az  $n_{is}$ -re vonatkozó (I.4) egyenletet  $s$ -el szorozva és összegezve, figyelembe véve a  $q$  definícióját, valamint az  $U(n)$  és  $U(p)$  befogási sebességek tulajdonságait, némi számolás után adódik:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{j}_n + \mathbf{j}_p) = 0. \quad (\text{I.10})$$

Ez természetesen érvényes az egyszerűbb „két-állapot-modell” esetére is. Más szóval, akármilyen rekombinációs mechanizmust tételezünk fel az  $n$  és  $p$  koncentrációkra vonatkozóan, a  $q$  tértöltés-sűrűség időbeli változását már csak a  $j = j_n + j_p$  teljes áram-sűrűség divergenciája szabja meg.

Az áraminstabilitás problémáinak matematikailag egzakt megfogalmazásához hozzátartozik a szereplő mennyiségek határfeltételeinek megadása, vagy egyéb fizikai megszorítások figyelembevétele. Két feltételt kell kiemelni. Az egyik, hogy



megköveteljük a teljes minta elektromos semlegességét, a másik a Kirchoff-tétel alkalmazása, mely a mintán eső feszültséget szabályozza. Írhatjuk tehát (a gyakorlatban előforduló egydimenziós esetre):

$$\int_0^L \varrho dx = 0 \quad (\text{I.11})$$

$$\int_0^L E dx = \mathcal{E}_{\text{eme}} - IR \quad (\text{I.12})$$

ahol  $L$  a minta hossza,  $I$  az  $R$  ellenállású körben folyó áram,  $\mathcal{E}_{\text{eme}}$  a körben levő telep elektromotoros ereje és nyilván az itt fellépő integrál a mintán eső feszültség. Az (I.11) egyenletben szereplő integrál a Poisson-egyenlet miatt az  $E$  térerősség periodicitását írja elő:  $E(0)=E(L)$ . Megjegyzem, hogy az elmélet alapkérdéseiről, elsősorban a lineáris elméletről, részletesen írtam az [I.65] munkámban.

## II. A TISZTA TÉRTÖLTÉSI HULLÁMOK ELMÉLETE

### II. 1. Az elmélet kritikai áttekintése

A rekombinációs instabilitás és a Gunn-effektus elméleti tárgyalása hasonló módszerekkel történhet. Ehhez elegendő meggondolni, hogy az alacsony mozgékonyaságú állapotokat zérus mozgékonyaságúnak tekinthetjük, s ezzel a lokalizált nívókon való térerősség-függő elektron-befogást figyelembe lehet venni. Látni fogjuk, hogy a hasonlóság ellenére, mégis lényeges különbség van a stacioneren mozgó Gunn-domének és a rekombinációs domének haladása között. Erre a különbségre éppen az általam kidolgozott módszer fizikai interpretálása világít rá.

A domén-mozgás elméletének két alapvető feladatát lehet megfogalmazni. Az egyik a domének, azaz a periódikus nagy térerősségű tartományok egzisztenciájának bizonyítása, a másik a mozgó domén sebességének ( $u_0$ ) és a domén mozgása alatt folyó áram ( $j_s$ ) meghatározása. Nyilvánvaló, hogy a problémát leíró nem-lineáris differenciálegyenlet-rendszer számítógépes vizsgálatával minden *konkrét modell* esetén, mindkét kérdés szimultán megoldható. Mégis, természetesnek tekinthető igény — különösen a kísérletező kutató számára — hogy explicit kifejezéseket kapjunk mind az egzisztenciára vonatkozóan, mind a kísérletekkel összevethető két alapvető paraméterre, a domén sebességére és az áramra.

Az első kvantitatív elméleti megfontolások után — ami *B. K. Ridley* [II.1], illetve *V. L. Bonch-Bruevich* és *M. S. Kagan* nevéhez fűződik [II.2] — két irányban indult meg a kutatás: a lineáris elmélet pontosítása [II.3—5] és a nem-lineáris elmélet kidolgozása irányában. Az utóbbi területen *P. N. Butcher* [II.6] és *V. L. Bonch-Bruevich* [II.7] voltak a kezdeményezők. Az elmúlt években számos érdekes dolgozat íródott mind a rekombinációs instabilitás [II. 8—13], mind a Gunn-effektusra vonatkozóan (II. 14—20]. A stacioner domén-mozgás nem-lineáris elméletével kapcsolatos saját eredményeimet a [II.21—26] dolgozatok tartalmazzák. A kérdéskör alapvető elméletét részletesen tárgyaltam „Áraminstabilitások Félvezetőkben” c. Kari Jegyzetemben (I.65], ezért itt a lineáris elmélet eredményeit csak főbb vonásaiban



ismertetem és a korlátokra elsősorban a rekombinációs instabilitás kapcsán mutatok rá. A nem-lineáris elmélet módszereit a Gunn-effektus példáján mutatom be, de az elmélet problémái, a gyakorlati felhasználás korlátai, mind a rekombinációs domének, mind a Gunn-doménekre egyaránt vonatkoznak.

### Lineáris elmélet

A lineáris elmélet kidolgozásakor B. K. Ridley [II.1] abból indult ki, hogy a több töltésállapottal rendelkező centrumok energia-nívói lényegesen távolabb vannak egymástól, mint a mérések hőmérsékletén a termikus energia. Ez azt jelenti, hogy elegendő csak két töltésállapotot figyelembe venni és így egyszerű Shockley—Read—Hall modell használható a rekombináció kinetikájának leírására. Könnyű belátni, hogy ilyenkor a töltésállapot abszolút értéke nem játszik szerepet a kinetikában (lásd pl. [I.61]). Mivel most a befogási paraméterek térfüggése a lényeges, az (I.1)—(I.4), (I.10) alapján a szükséges egyenleteket könnyű felírni. Egydimenziós esetet vizsgálva és ismét a töltés-sűrűségeket vezetve be a koncentrációk helyett, azaz  $q_n = qn$ , illetve  $q_2 = qn_2$  a betöltött centrumokon levő töltés (az üres centrumok koncentrációja  $p_t: n_t + p_t = N_t$ ), az alábbi egyenletek adódnak:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial j_n}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.1})$$

$$j_n = q_n \mu_n E + \frac{\partial (D_n q_n)}{\partial x} \quad (\text{II.2})$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_n - q_2) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} q \quad (\text{II.3})$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} = C_0 \left[ N_t - \frac{q_2}{q} \right] f_n(E) - n_1 q_2 \equiv \psi(q_n, q_2, E) \quad (\text{II.4})$$

ahol az  $n_{t,1} = n_t$ ;  $n_{t,0} = p_t$  jelölést használtam,  $C_0$  a befogási paraméter értéke kis elektromos térnél,  $f_n(E)$  a befogás térfüggését leíró függvény, míg  $n_1 = \Gamma_{n,0}^1 = n_0 n_{t0} / p_{t0}$  a S—R—H modell ismert paramétere. (Itt a zérus index nyilván nem a töltésállapotra utal, hanem az egyensúlyi értéket jelöli.) A fenti nem-lineáris differenciálegyenlet-rendszer általános megoldását gyakorlatilag nem lehet megadni, hiszen még speciális esetekben is csak közelítő megoldások ismertek és jelenleg egy „tetszőleges” függvény  $f_n(E)$  is szerepel. Ezen általános megoldásokból kell kiválasztani azt a megoldást, amely a mellékfeltételeket is kielégíti.

A lineáris elméletben a fenti egyenleteket valamely stacioner, térben és időben állandó megoldás körül fejthük sorba és vizsgáljuk ezen állapot körüli kis amplitúdójú fluktuációkat NDV esetén [II. 1—2]. A számításoknál — mind a lineáris, mind a nem-lineáris elméletben — szokásos feltételezés, hogy  $n_{t0}, p_{t0} \gg n_0$  és így a (II.4) egyenlet a koncentrációkban linearizálható

$$\Psi \approx \frac{1}{\tau_r(E)} q_n - \frac{1}{\tau_g} q_2 \equiv \Psi_l \quad (\text{II.5})$$

ahol

$$\tau_r(E) = \frac{1}{C_0 p_{t0} f_n(E)}; \quad \tau_g = \frac{1}{C_0 [n_1 + n_0 f(E)]} \approx \frac{1}{C_0 n_1},$$



azaz a generáció  $\tau_g$  időállandója független a térerősségtől. Ez a közelítés még közelebb hozza a „két-állapot” modellt és a rekombinációs instabilitást, hiszen (II.5) formailag teljesen azonos az (I.9) egyenlettel, bár a szereplő időállandók több nagyságrenddel különböznek egymástól.

Fejtsük most sorba a szereplő  $E$ ,  $q_n$ ,  $q_2$  függvényeket egy „s” indexszel jelölt állapot körül. Mivel ilyenkor  $E_s = \text{konstans}$ , tértöltés sincs, tehát az  $s$  indexű állapotban  $q_s \equiv q_0 - q_{ns} - q_{2s} = 0$ . A  $q_n = q_{ns} + u$ ;  $E = E_s + v$ ,  $q_2 = q_{2s} + w$  és  $q = q_s + q \equiv q$  jelölésekkel elvégezve a linearizálást, pl. az  $(u, q)$  változókra nézve felírhatjuk a megoldandó lineáris parciális differenciálegyenlet rendszert. A megoldást Ridley után a következő alakban kereshetjük:

$$q = q_k e^{i(kx - \omega t)}; u = u_k e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{II.6})$$

és akkor (állandó  $D_n$  és  $\mu_n$  értékeket feltételezve) a következő egyenletrendszer adódik:

$$\left( \frac{\tau_{rs}}{\tau_{Ms}} - i\omega\tau_{rs} \right) q + (i\lambda_s k - L_s^2 k^2) u = 0 \quad (\text{II.7a})$$

$$\left( i\omega\tau_{rs} + \frac{\tau_{rs}}{\tau_{xr}} \cdot \frac{1}{ik\lambda_s} - \frac{\tau_{rs}}{\tau_g} \right) q + \left( i\omega\tau_{rs} - 1 - \frac{\tau_{rs}}{\tau_g} \right) u = 0 \quad (\text{II.7b})$$

ahol a következő jelöléseket vezettük be:

$$\tau_{Ms} = \frac{\varepsilon}{4\pi q_{ns} \mu} \quad ; \quad v_s = \mu E_s; \quad \lambda_s = v_s \tau_{rs}$$

$$L_s^2 = D_n \tau_{rs}, \quad \tau_{xr}^{-1} = \frac{E_s \dot{\tau}_{rs}}{\tau_{rs} \tau_{Ms}}$$

Itt  $\dot{\tau}_{rs}$ -nál a pont az  $E$  szerinti differenciálást jelenti, ami a  $\tau_r(E)$  függvény sorbafejtésénél lép fel. A (II.7) egyenletrendszerből a szokásos módon jutunk a diszperziós relációhoz. A determináns zérus volta két egyenletet ad a valós  $k$  hullámszámmra és az  $\omega$  frekvenciára. Mivel  $\tau_{rs}/\tau_g$ ,  $L_s^2/\lambda_s^2 \ll 1$ , a következő kifejezés nyerhető (a részletes számolást az [I.65] munkában közöltem):

$$\lambda_s^2 k^2 = - \frac{\frac{\tau_{rs}}{\tau_{x0}} \left( 1 + \frac{\tau_{rs}}{\tau_{Ms}} \right)}{\frac{\tau_{rs}}{\tau_g} + \frac{L_s^2}{\lambda_s^2} \cdot \frac{\tau_{rs}}{\tau_{Ms}}} \quad (\text{II.8})$$

ahol

$$\frac{1}{\tau_{x0}} = \frac{1}{\tau_{Ms}} + \frac{1}{\tau_{xr}} = \frac{1}{\tau_{Ms}} \left( 1 + \frac{E_s \dot{\tau}_{rs}}{\tau_{rs}} \right) \equiv \frac{1}{\tau_{Ms}} (1 - \gamma_{ts}) \quad (\text{II.9})$$

A  $k^2$  csak akkor pozitív, ha  $\tau_{x0} < 0$ , azaz, ha

$$\gamma_{ts} = - \frac{E_s}{\tau_{rs}} \left( \frac{d\tau_r}{dE} \right)_s > 1$$

más szóval, növekvő térerősséggel a töltéshordozók élettartamának csökkennie kell (NDV).



A tértöltéshullámok  $\omega/k$  fázissebességét azonosítva az  $u_0$  domén-sebességgel, Ridley a következő kifejezést kapta:

$$u_0 = -v_s \cdot \frac{\frac{\tau_{rs}}{\tau_g} + \frac{L_s^2}{\lambda_s^2} \cdot \frac{\tau_{rs}}{\tau_{Ms}}}{1 + \frac{\tau_{rs}}{\tau_{Ms}}} \quad (\text{II.10})$$

Mivel a kiinduló egyenletekben a  $v_s$  driftsebesség és az áram előjele megegyezik, a negatív előjel azt jelenti, hogy a hullámterjedés az árammal ellentétes irányú, azaz megegyezik az elektronok tényleges mozgásirányával.

A (II.10) alapján a tértöltéshullám sebességét egyszerűen interpretálhatjuk. Valóban — figyelembe véve a szereplő mennyiségek gyakran előforduló nagyságrendjét — két esetet lehet vizsgálni, a  $\tau_{rs}/\tau_{Ms}$  értékétől függően. Ha  $\tau_{rs}/\tau_{Ms} \ll 1$ , akkor

$$-u_0 = \frac{\tau_{rs}}{\tau_g} v_s \quad (\text{II.11})$$

míg ellenkező esetben, beírva  $L_s^2$  és  $\lambda_s^2$  értékét, adódik:

$$-u_0 = \frac{D_n}{\tau_{rs} v_s} \quad (\text{II.12})$$

A (II.11) szokásos interpretálása: a „domén” sebessége megegyezik a driftsebesség  $\tau_{rs}/\tau_g$  arányában lecsökkentett értékével, hiszen az elektron csak rövid ideig tartózkodik a vezetési sávban, az idejének nagy részét a lokalizált állapotokban tölti. Mivel  $\tau_{rs}/\tau_g \ll 1$ , adódik:  $|u_0| \ll v_s$ .

A (II.12) esetet úgy szokás értelmezni, hogy a domén-mozgást a diffúziós folyamat korlátozza, ami nyilván nagy  $k^2$  értékeknél várható. Az előzők alapján a min-tában folyó áram is felírható.

A fenti lineáris elmélet két lényeges pontban nem felel meg a kísérleti tényeknek. Az egyik, hogy a kísérletileg megfigyelt domén-instabilitásnál mindig egyetlen nagy térerősségű tartomány alakul ki és nem a (II.6)-nak megfelelő hullám. Ez a domén nem tekinthető kis perturbációnak.

A másik tény, hogy a kísérletileg megfigyelt domén-sebességek lényegesen kisebbek a (II.10) által számított értékénél. A lineáris elmélet a *Gunn-effektus* esetén is alkalmazható. A számítás lényegesen egyszerűbb, mivel most nincsenek lokalizált nívók. A NDV-t egy térerősség-függő effektív mozgékonyssággal, vagy  $v_d(E)$  driftsebességgel lehet figyelembe venni. A megoldandó egyenletek:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{\partial j_n}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.13})$$

$$j_n = \varrho_n v_d(E) + \frac{\partial (D_n \varrho_n)}{\partial x} \quad (\text{II.14})$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi}{\varepsilon} (\varrho_0 - \varrho_n) = \frac{4\pi}{\varepsilon} \varrho \quad (\text{II.15})$$



A linearizált egyenlet  $q$ -ra nézve:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{q}{\tau_M} + \left( \frac{E_s \dot{D}_{ns}}{v_{ds} \tau_M} - v_{ds} \right) = \frac{\partial q}{\partial x} - D_{ns} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0$$

ahol

$$\frac{1}{\tau_M} = \frac{1}{\tau_{Ms}} (1 - \gamma_{\mu s}); \quad \gamma_{\mu s} = -\frac{E_s}{\mu_s} \left( \frac{d\mu}{dE} \right)_s \quad (\text{II.16})$$

A  $q = q_k \exp i(kx - \omega t)$  alakban keresve a megoldást a diszperziós reláció alapján ismét két összefüggést kapunk  $\omega$ -ra és  $k$ -ra:

$$1 + D_{ns} \tau_M k^2 = 0$$

$$\omega + \left( v_{ds} - \frac{E_s \dot{D}_{ns}}{v_{ds} \tau_{Ms}} \right) k = 0.$$

Ezekből:

$$k^2 = -\frac{1}{D_{ns} \tau_M} = -\frac{1 - \gamma_{\mu s}}{D_{ns} \tau_{Ms}} \quad (\text{II.17a})$$

$$-u_0 = v_{ds} - \frac{E_s \dot{D}_{ns}}{\tau_{Ms} v_{ds}} \quad (\text{II.17b})$$

Ismét látjuk, hogy  $k^2$  csak akkor lesz pozitív, ha  $\gamma_{\mu s} > 1$ , azaz a mozgékonyság növekvő térrel megfelelő mértékben csökken.

A domén-sebesség — egy kis korrekciótól eltekintve — amelyet a  $D_n$  térfüggése okoz, megegyezik az elektronok driftsebességével,  $v_{ds} = v_d(E_s)$  értékkel. A lényeges ellenvetés a lineáris elmélettel szemben, hogy a domén nem kis perturbáció, mivel  $E_0/E_s \approx 10^3$  ( $E_0$  a csúcstérerősség,  $E_s$  a doménen kívüli térerősség). A lineáris elmélettel számos szerző foglalkozott [II.3]—[II.5], ezekre itt nem térek ki.

### Nem-lineáris elmélet

A nem-lineáris elmélet kiinduló pontja *P. N. Butcher* [II.6] és *V. L. Bonch—Bruevich* [II.7] felismerése, hogy a stacioner domén-mozgás esetén szereplő függvények  $E$ ,  $q$ ,  $n$ ,  $n_{ts}$  stb. csak a

$$z = x - u_0 t. \quad (\text{II.18})$$

mennyiségen keresztül függenek a helytől és időtől, azaz hullámszerű megoldást kell keresni. Itt  $u_0$  az alakváltozás nélkül haladó domén sebessége. Ez azt jelenti,

hogy  $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{d}{dz}$ ,  $\frac{\partial}{\partial t} = -u_0 \frac{d}{dz}$ . A fenti alakú megoldást Riemann-típusú megoldásnak szokás nevezni, a plazmafizikában használt lökéshullámok analógjaként.

A lényeges pont, hogy a  $z$  változó bevezetésével közönséges nem-lineáris differenciálegyenletrendszer adódik, amely az esetek többségében két változós autonóm differenciálegyenletet jelent, pl. az  $E(z)$  és a  $q(z)$  függvényekre nézve. Az autonóm differenciálegyenletek elmélete [II.27]—[II.29], lehetőséget ad azokat a feltételeket meghatározni, amelyek periódikus megoldást biztosítanak az  $E(z)$ -re nézve, vagy ha az

$E(z), q(z) \sim \frac{dE}{dz}$  fázissíkon ábrázoljuk a megoldásokat, akkor ott zárt görbét ered-



ményeznek. A kérdéskör részletes analizisét a nemrég megjelent [II.30] könyv tárgyalja.

A nem-lineáris elmélet által kitűzött cél az, hogy az autonóm differenciálegyenlet rendszer analizise alapján (pl. a szinguláris pontok körüli viselkedésből) a periódikus megoldás egzisztenciájának explicit feltételét és ezzel együtt a domén-sebességet is származtassa.

Már most előre kell bocsátani, hogy jelenleg nem ismeretes olyan általános analitikus módszer, amelynek segítségével ez a cél megvalósítható lenne. Vizsgáljuk a kérdést kissé részletesebben. A Riemann-féle megoldást feltételezve a (II.1)–(II.4) egyenletek helyébe a következők lépnek [II.6], [II.7], [II.30]:

$$-u_0 q' + j_n' = 0 \quad (\text{II.19a})$$

$$j_n = q_n \mu_n E + D_n q_n' + \dot{D}_n q_n E' \quad (\text{II.19b})$$

$$E' = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_n - q_2) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} q \quad (\text{II.19c})$$

$$-u_0 q_2' = \Psi(q_n, q_2, E) \quad (\text{II.19d})$$

ahol a ' a z-szerinti deriválást, a  $\dot{\phantom{x}}$  az  $E$  télerősség szerinti deriválást jelenti. A (II.19) alapján a következő állítás látható be: a Riemann-típusú megoldás esetén a mintán átfolyó teljes (vezetési + eltolási) áram  $j_s = j_n + \frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\partial E}{\partial t}$  állandó. Valóban (II. 19a) egyszer integrálható és  $j_s$ -el jelölve az integrációs állandót, kapjuk:

$$-u_0 q + j_n = j_s = \text{konstans} \quad (\text{II.20})$$

és a baloldal éppen a teljes áram, ha figyelembe vesszük a Poisson-egyenlet (II.19c) alakját.

A *Gunn effektus* tárgyalásánál (II. 19d) elhagyható és (II.19a) helyett (II.20)-at használva, valamint a (II.19b)-ben a  $\dot{D}_n q_n E'$  elé egy  $\eta$  szorzót téve, melyre  $\eta=0$ , ha  $\dot{D}_n$  az eredeti (II. 2) egyenletben a  $\frac{\partial}{\partial x}$  előtt állt és  $\eta=1$ , ha  $\frac{\partial}{\partial x}$  mögött állt, kapjuk:

$$j_s = -u_0 q + j_n \quad (\text{II.21a})$$

$$j_n = q_n \mu_n E + D_n q_n' + \eta \dot{D}_n q_n E' \quad (\text{II.21b})$$

$$E' = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_n) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} q \quad (\text{II.21c})$$

A (II.21a)-ból  $j_n$ -t egyenlővé téve (II.21b) jobboldalával, és ide  $q_n$  helyébe beírva a  $q_n = q - q_0$ , valamint az  $E' = \frac{4\pi}{\varepsilon} q$  összefüggést a  $\frac{dq}{dz}$  kifejezhető, mint  $(q, E)$  függvénye. A (II.21c) viszont a  $\frac{dE}{dz}$ -t adja a  $(q, E)$  függvényében:

$$\frac{dE}{dz} = \frac{4\pi}{\varepsilon} q \equiv P(E, q) \quad (\text{II.22a})$$

$$\frac{dq}{dz} = \frac{1}{D_n(E)} \left\{ (q_0 - q) \left[ v_d(E) + \eta \dot{D}_n \frac{4\pi}{\varepsilon} q \right] - u_0 q - j_s \right\} \equiv Q(E, q) \quad (\text{II.22b})$$



A (II.22) az  $E(z)$ ,  $q(z)$  függvényekre nézve nem-lineáris autonóm differenciálegyenlet rendszer. Annak eldöntése, hogy milyen feltételek mellett létezik periódikus megoldás, (II.22) szinguláris pontjainak jellegét kell vizsgálni, melyeket a  $P(E, q) = 0$ ,  $Q(E, q) = 0$  feltételek határoznak meg. (Lásd pl. [II.28], vagy [I.65]). Esetünkben ez a  $q = 0$ ,  $j_s = q_0 v_d(E_i)$ , ( $i = 1, 2, 3$  az adott esetben) feltételekhez vezetnek. Ismerve a  $v_d(E)$  függvényt, a szinguláris pontok helyei meghatározhatók. A részletes vizsgálatok szerint, amely a (II.22) egyenletek szinguláris pontja körüli linearizálással történik, megállapítható, hogy az  $E_1, E_3$  nyeregpont, az  $E_2$  fókusz vagy centrum. Mivel az  $E_3$  olyan nagy érték, hogy a gyakorlatban nem érhető el a periódikus megoldás, azt várjuk, hogy a fázis-trajektória az  $E_1$  nyeregpontból kiindulva, megkerüli az  $E_2$  szinguláris pontot és visszatér  $E_1$ -be ([II.20] dolgozat 1. ábra). Ismeretes, ha a szinguláris pont centrum, akkor a megoldás periódikus. Ezt a tényt használják leggyakrabban a nem-lineáris elmélet tárgyalásánál. Pontosabban *megkövetelve*, hogy az  $E_2$  centrum legyen, explicit kifejezést kapnak a domén-sebességre. Így a rekombinációs instabilitás esetén [II.10], [II.12], [II.34], míg a Gunn-effektusnál maga Gunn [II.18], valamint [II.33]-ban végeztek hasonló számítást.

Más szóval, a domén mozgását éppen úgy alakítja, hogy az  $E_2$  centrum legyen! Ez a megoldás nem helyes, mivel a centrum feltételét a linearizált egyenletből származtatják és a magasabb rendű tagok általában a centrumot gyenge fókusszá változtatják. A Gunn-effektus esetén *E. L. Jones* mutatott rá arra, hogy a [II.22] egyenletrendszer fázistérbeli képe lényegesen függ az  $\eta$  értékétől  $\eta = 0$  esetén valóban centrum az  $E_2$  szinguláris pont, míg  $\eta = 1$  esetén ez a szinguláris pont fókusz. Ilyenkor is létezhet periódikus megoldás: az ún. „limit-cycle”, határciklus, amikor a szereplő  $u_0$  paraméter egy bizonyos értékénél kialakul egy izolált periódikus megoldás. Ez az érték azonban különbözik attól az értéktől, amely az  $E_2$  centrummá tételéhez szükséges [II.20].

Jelenleg nem ismeretes olyan kritérium, amely alapján a határciklus szükséges és elegendő feltétele megfogalmazható lenne. Felvethető a kérdés, vajon a rekombinációs instabilitásnál, ahol  $D_n$  konstansnak tekinthető, tehát a  $\dot{D}_n$ -t tartalmazó tag nem lép fel, talán egyszerűbb az eset?

Legyen a (II.19) egyenletekben  $\mu_n, D_n$  állandó. Tegyük fel azt is, hogy az elektron-befogás olyan gyors, hogy a vezetési sáv és a centrum között azonnal kialakul az egyensúly, azaz  $\Psi(q_n, q_2, E) = 0$ . Ha még  $\Psi$ -t linearizáljuk a koncentrációkra nézve (lásd (II.5) egyenlet), akkor

$$q_2 = \frac{\tau_g}{\tau_r(E)} \cdot q_n = r(E) q_n$$

és így a (II.22) egyenletek helyett az alábbi adódik:

$$\frac{dE}{dz} = \frac{4\pi}{\varepsilon} q = P(E, q) \quad (\text{II.23a})$$

$$\frac{dq}{dz} = \frac{1}{D_n r(E)} \left\{ (q_0 - q) \left[ r(E) \cdot \mu_n E + D_n \dot{r}(E) \frac{4\pi}{\varepsilon} q \right] - u_0 q - j_s \right\} = Q(E, q) \quad (\text{II.23b})$$

Összehasonlítva a (II.22b) és (II.23b) egyenletek struktúráját, az  $\eta$ -t tartalmazó



tagnak a  $D_n \dot{r} \frac{4\pi}{\varepsilon} \varrho$  felelne meg. Ez azonban éppen azt a  $\tau_r(E)$  függvényt tartalmazza, amelynek következménye a NDV, míg a Gunn-effektusnál a  $\dot{D}_n$ -t tartalmazó tag elhagyása nem befolyásolja a NDV létezését, amely a  $v_d(E)$ -vel kapcsolatos\*. Más szóval a rekombinációs instabilitásnál a centrum létezése gyakorlatilag kizárt és így a domén-sebességet nem lehet egyszerű úton meghatározni a nem-lineáris autonóm differenciálegyenlet alapján. A nem-lineáris elmélet ismertetett formájával szemben egy további ellenvetés, hogy minden mennyiséget az  $E_2$  szinguláris pontban kell meghatározni. Ez a kialakult doménből kiindulva nem lehetséges, míg az I—V karakterisztika felvétele az  $E_2$ -nek megfelelő pont körül rendkívülien nehéz, mert az  $E_2$ -nek megfelelő feszültség körül a rendszer általában „domenizálódni” fog.

## II. 2. A domén-alak paraméterek (DAP) módszere

Mind a lineáris, mind a nem-lineáris elmélet helyesen adja vissza a domén-instabilitás alapvető feltételét (ti. a NDV-t), de a kísérletek alapján kapott domén-sebességre — a rekombinációs instabilitás esetén — nem ad helyes értéket. Ez vetette fel a gondolatot, hogy a probléma talán abban van, hogy az eddigi lineáris és nem-lineáris elméletek áram- és sebesség kifejezéseiben a domén alakja explicite nem szerepel. Ez úgy is fogalmazható, hogy ezeket a mennyiségeket lokális tulajdonságnak tekintették. Egy másik természetesnek látszó lehetőség, hogy a rekombinációs domének mozgását más centrumok (csapdák) befolyásolják, amelyek szokásos körülmények között nem mutatkoznak meg, csak éppen a nagyterű domén jelenlétében.

A meglevő elméleteknek azonban van egy további lényeges hiányossága. A kísérletek szerint ugyanis a  $j_s$  áram nem változik lényegesen az alkalmazott feszültség változtatásával, míg a domén-sebesség érzékenyen függ a feszültségtől, ugyanakkor az elmélet csak azt jósolja meg, hogy  $u_0$  arányos  $j_s$ -el:

$$|u_0| = k j_s \quad (\text{II.24})$$

ahol  $k$  tértől független mennyiség. Az alábbiakban kifejtésre kerülő elmélet lehetővé teszi az elmélet és kísérlet között levő lényeges eltérések feloldására.

### II. 2a. A DAP-módszer rekombinációs instabilitás esetében

A Riemann-féle megoldást leíró (II.19) egyenletekből indulunk ki. Feltesszük, hogy a rekombinációt leíró (II.19d) egyenlet linearizálható a koncentrációkban, azaz  $\Psi$  helyébe  $\Psi_l$  írható, a (II.5) egyenletnek megfelelően. Nem jelent elvi korlátozást, hogy a mozgékonytságot és a diffúziós állandót most térerősségtől függetlennek tekintjük. Az első lépés a  $\varrho_n$  és  $\varrho_2$  függvények meghatározása az  $E$  térerősség és annak deriváltjainak függvényében, azaz a  $\varrho_n(E, E', \dots)$ ;  $\varrho_2(E, E', \dots)$  függvényeké, majd az  $E(z)$ -re vonatkozó nem-lineáris differenciálegyenlet felírása következik. A (II.19c) Poisson-egyenletből a teljes negatív töltést kifejezhetjük:

$$\varrho_n + \varrho_2 = \varrho_0 - \frac{\varepsilon E'}{4\pi} \equiv T.$$

\* Természetesen más kérdés, hogy térfüggő mozgékonyság esetén általában a diffúziós együttható is függ a tértől [II. 31], [III. 32].



Ezt ismét deriválva  $z$ -szerint, valamint felhasználva a (II.20) összefüggést, a következő egyenletrendszer adódik a szereplő mennyiségekre:

$$\begin{aligned} \varrho_n + \varrho_2 &= T \\ \varrho_n \mu_n E + D_n \varrho'_n &= \frac{u_0 \varepsilon E'}{4\pi} + j_s \\ -u_0 \varrho'_2 &= \frac{1}{\tau_r(E)} \cdot \varrho_n - \frac{1}{\tau_g} \cdot \varrho_2 \\ \varrho'_n + \varrho'_2 &= T' \end{aligned} \quad (\text{II.25})$$

A fenti egyenletrendszerből elemi úton meghatározhatók a keresett  $\varrho_n(E, E', E'')$ ,  $\varrho_2(E, E', E'')$  függvények:

$$\varrho_n = \frac{R + TM}{L + M}; \quad \varrho_2 = \frac{-R + TL}{L + M} \quad (\text{II.26})$$

$$L = \mu_n E u_0 + \frac{D_n}{\tau_r}; \quad M = \frac{D_n}{\tau_g} \quad (\text{II.26}')$$

$$R = u_0 \left( j_s + \frac{u_0 \varepsilon E'}{4\pi} + \frac{D_n \varepsilon E''}{4\pi} \right)$$

A  $\varrho_n = \varrho_n(E, E', E'')$  függvény ismeretében az  $E$ -re vonatkozó differenciálegyenlet is felírható, ha  $\varrho_n$ -t behelyettesítjük pl. a (II.25) második egyenletébe:

$$F(E, E', E'', E''') \equiv \varrho_n \mu_n E + D_n \sum_{i=0}^2 \frac{\partial \varrho_n}{\partial E^{(i)}} E^{(i+1)} - j_s - \frac{u_0 \varepsilon E'}{4\pi} = 0 \quad (\text{II.27})$$

A (II.27) harmadrendű nem-lineáris differenciálegyenlet az  $E(z)$  függvényre, melyben az  $u_0, j_s$  paraméterek szerepelnek. Az egzakt, de analitikus módszerekkel járhatatlan út az lenne, hogy (II.27)-et megoldanánk az (I.11) feltétel mellett. A megoldás periódikus voltának megkövetelése előírja az  $u_0$  értékét.

Lényeges megjegyezni, hogy a vezetési sáv és a centrumok közötti kvázi-egyensúly feltételezése nem harmadrendű, hanem csak másodrendű differenciálegyenletet eredményez. Ezt az egyenletet valójában már felírtam a (II.22) alakban, ugyanis ha (II.22a)-ból  $\varrho$ -t kifejezzük az  $E'$  segítségével és behelyettesítjük a (II.22b)-be, akkor a keresett differenciálegyenletet kapjuk.

Az autonóm differenciálegyenletek nyelvén a (II.27) ekvivalens az  $(E, \varrho_n, \varrho_2)$ -re vonatkozó következő egyenletrendszerrel:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dz} &= \frac{4\pi}{\varepsilon} (\varrho_0 - \varrho_n - \varrho_2) = \mathcal{P}(E, \varrho_n, \varrho_2) \\ \frac{d\varrho_n}{dz} &= \frac{1}{D_n} \cdot [u_0 (\varrho_0 - \varrho_n - \varrho_2) + j_s - \varrho_n \mu_n E] = \mathcal{Q}(E, \varrho_n, \varrho_2) \\ \frac{d\varrho_2}{dz} &= \frac{1}{u_0} \cdot \left[ \frac{1}{\tau_g} \cdot \varrho_2 - \frac{1}{\tau_r(E)} \cdot \varrho_n \right] = \mathcal{R}(E, \varrho_n, \varrho_2) \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$



Ennek a rendszernek az  $(E, q_n, q_2)$  fázistérbeli vizsgálata lényegesen bonyolultabb, mint a kétváltozós eset és ismeretem szerint ezt eddig csak a [II.33] és [II.34]-ben kísérelték meg, azonban azt a kérdést, hogy a linearizált egyenletekből kapott centrum valóban az marad-e magasabb közelítésben, nem vizsgálták.

A szinguláris pontokat most  $\mathcal{P}=0$ ,  $Q=0$ ,  $\mathcal{R}=0$  egyenletek adják és innen azonnal látszik, hogy míg a kvázi-egyensúly feltételezése az  $\mathcal{R}\equiv 0$  egyenlettel számol, az  $\mathcal{R}=0$  valójában csak a szinguláris pont helyét írja elő, azaz csak meghatározott pontokban lesz érvényes. A további számításoknál nem a (II.27), vagy (II.28) egyenletek analitikus vagy numerikus megoldásával kísérletezem (ez utóbbi járható út), hanem feltételezem, hogy az  $E(z)$  függvény és annak deriváltjai ismertek valamilyen pontban, pl. a  $z_0$  neutrális pontban, amelynek definíciója nyilván  $E'(z_0)=0$ , és megmutatom, hogy ezek segítségével meghatározható az  $u_0$  és  $j_s$ .

*Az  $u_0$  és  $j_s$  meghatározása tetszőleges domén-alak esetén*

A további számolás a (II.19a) és (II.20) egyenletekből indul ki. Vegyük a két egyenletet a neutrális pontban, ahol tehát  $E'(z_0)=0$ , és jelöljük „ $_0$ ” index-szel a különböző mennyiségek e pontbeli értékét, mely a csúcstérnek felel meg:

$$j_s = q_{n0}v_0 + D_n q'_{n0} \quad (\text{II.29})$$

$$\frac{\varepsilon}{4\pi} E''_0 u_0 = q'_{n0}v_0 + D_n q''_{n0} \quad (\text{II.30})$$

A (II.29) és (II.30) egyenletekből látható, hogy ha ismernénk a  $q_n$ ,  $q'_n$ ,  $q''_n$ , és  $E''$  értékét a neutrális pontban, akkor mind  $j_s$ , mind  $u_0$  meghatározható lenne. A (II.26) azonban megadja a  $q_n = q_n(E, E', E'')$  összefüggést és így ezt felhasználva mind  $q_n$ , mind  $q'_n$ ,  $q''_n$  kifejezhető  $E$  és deriváltjai segítségével.

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r(E)} + \frac{1}{\tau_g}; \quad \gamma_\tau = -\frac{E_0}{\tau_{r0}} \left( \frac{d\tau_r}{dE} \right)_0$$

$$v_0 = \mu_n E_0; \quad \tau_{M0} = \frac{\varepsilon}{4\pi q_0 \mu_n}$$

ekkor

$$M_0 + L_0 = u_0 v_0 + \frac{D_n}{\tau_0}; \quad L'_0 = \left( \mu_n u_0 + \frac{\gamma_\tau D_n}{E_0 \tau_{r0}} \right) E''_0; \quad M' = 0,$$

ahol az utolsó egyenletet a  $\tau_g = \text{konstans}$  feltevés miatt írhattuk. Most  $q_{n0}$ ,  $q'_{n0}$  értékeit kiszámítva és behelyettesítve a (II.29)-be, adódik:

$$j_s = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 q_0 \frac{\tau_0}{\tau_n} D_n S_2 + \tau_0 u_0 (v_0 S_2 + D_n S_3) + \tau_0 u_0^2 S_2, \quad (\text{II.31})$$

ahol bevezettem a domén-alakra jellemző

$$S_i = \frac{\varepsilon}{4\pi} \left( \frac{d^i E}{dz^i} \right)_0, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$



jelöléseket. A domén-alakot ezek jellemzik a neutrális pont körül és ezeket lehetne DAP-nek tekinteni, azonban mint látni fogjuk, nem pont ezek a domén-mozgást meghatározó karakterisztikus mennyiségek, hanem a probléma más mennyiségeivel való kombinációjuk, és azokat célszerűbb domén-alak-paramétereknek nevezni.

Egyszerű, de hosszadalmasabb számolás után a domén-sebességre a következő algebrai egyenlet adódik, az  $S_i$  paraméterek függvényében:

$$b_3 u_0^3 + b_2 u_0^2 + b_1 u_0 + b_0 = 0 \quad (\text{II.32})$$

$$b_3 = v_0 S_3$$

$$b_2 = \frac{D_n}{\tau_0} S_3 + v_0 P - \frac{4\pi\mu_n S_2}{\varepsilon} (j_s + D_n S_2)$$

$$b_1 = \frac{D_n}{\tau_0} P - v_0 K - S_2 \left[ \frac{D_n}{\tau_g \tau_{M0}} + \frac{4\pi\mu_n \gamma_\tau D_n}{\varepsilon v_0 \tau_{r0}} (j_s + D_n S_2) \right]$$

$$b_0 = \frac{D_n}{\tau_0} K - \frac{S_2 \gamma_\tau D_n^2}{v_0 \tau_{r0} \tau_g \tau_{M0}}$$

és itt

$$P = -\frac{S_2}{\tau_0} + v_0 S_3 + D_n S_4; \quad K = \frac{v_0}{\tau_g} S_2 + \frac{D_n}{\tau_g} S_3$$

A (II.31)–(II.32) az  $S_i$  paramétereket tartalmazó csatolt algebrai egyenletrendszer a keresett  $u_0$  és  $j_s$  mennyiségekre. Helyettesítsük be (II.31)-et a  $b_2$  és  $b_1$  együtthatókba, akkor  $u_0$ -ra negyedfokú algebrai egyenlet adódik. Mielőtt felírom ezt, célszerű bevezetni dimenziótlan mennyiségeket. Legyen  $x = u_0/w_0$  a dimenziótlan sebesség, ahol definíciószerűen:

$$w_0 = \frac{D_n}{v_0 \tau_0}$$

akkor némi számolás után kapjuk  $x$ -re:

$$a_4 x^4 + a_3 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0 \quad (\text{II.33})$$

$$a_4 = -\alpha_0 \alpha_d;$$

$$a_3 = -\alpha_0 (1 + \alpha_3) - \alpha_0 \alpha_d \alpha_r \gamma_\tau + \alpha_d \alpha_3;$$

$$a_2 = -\alpha_d K_1 - \alpha_0 \alpha_r - \alpha_0 \alpha_r \gamma_\tau (1 + \alpha_3) + \alpha_d \alpha_3;$$

$$a_1 = -\alpha_g K_2 - \alpha_d K_1 - \alpha_0 \alpha_r^2 \gamma_\tau;$$

$$a_0 = -\alpha_g K_2.$$

Itt az egyes dimenziótlan mennyiségek definíciója:

$$\alpha_d = \frac{D_n}{v_0^2 \tau_0}; \quad \alpha_r = \frac{\tau_0}{\tau_{r0}}; \quad \alpha_g = \frac{\tau_0}{\tau_g}; \quad \alpha_M = \frac{\tau_0}{\tau_{M0}};$$

és végül a *domén-alak-paraméterek*:

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \frac{D_n^2 S_2}{v_0^2 S_0}; \quad \alpha_2 = v_0 \tau_0 \frac{S_3}{S_2}; \\ \alpha_3 &= \frac{D_n S_3}{v_0 S_2}; \quad \alpha_4 = D_n \tau_0 \frac{S_4}{S_2}.\end{aligned}\tag{II.34}$$

A fenti átalakításnál hallgatólagosan feltételeztem, hogy az  $S_2 \neq 0$ , ami megfelel annak, hogy a  $z_0$  pontban a térerősségnek maximuma van. Ha a domén olyan „lapos” lenne, hogy  $S_2 = 0$ , akkor közvetlenül a (II.31), (II.32) egyenletekből kell kiindulni, ilyenkor természetesen a maximum létezése megköveteli, hogy  $S_3$  is zérus, de  $S_4 \neq 0$  legyen. Könnyű meggyőződni arról, hogy ilyenkor két gyöke van (II.32)-nek:  $u_0 = 0$  és  $u_0 = -w_0$ .

Ezzel tulajdonképpen a kitűzött célt a fenti egyszerű modellben elértem: az  $u_0$  meghatározható a térerősségnek és *kevésszámú* deriváltjának ismeretében. Az  $u_0$ -ra levezetett negyedfokú egyenlet alapján számolt domén-sebességet (II.32)-be téve a  $j_s$  áram is meghatározható.

*Közelítő kifejezések a  $j_s$  áramra és  $u_0$  sebességre*

Ismerve a szereplő paraméterek szokásos értékét könnyű meggyőződni arról, hogy a (II.33) gyökei szeparáltak, azaz  $|x^{(i)}| \gg |x^{(i-1)}|$  ( $i = \text{II, III, IV}$ ). Ebben az esetben az  $x^{(i)} \approx -a_{i-1}/a_i$  közelítés is használható. A következőkben mégis inkább egy plauzibilis fizikai közelítéssel fogok élni, hogy jól használható kifejezéseket kapjunk. A (II.29) áram-kifejezésben elhanyagolom a diffúziós állandót tartalmazó  $D_n \varrho'_{n0}$  tagot a „drift”-tag mellett. Ez jelentősen egyszerűsíti a (II.31) áram-kifejezést:

$$j_s = \frac{\tau_0}{\tau_g} \varrho_0 v_0 + \tau_0 u_0 v_0 S_2.\tag{II.35}$$

A fenti közelítéssel kapcsolatban a következő megjegyzés szükséges. A  $D_n \varrho'_{n0}$  elhanyagolása nem ekvivalens a  $D_n \rightarrow 0$  határátmenettel, mivel a  $\varrho'_{n0}$  derivált explicite tartalmazza a  $D_n$  diffúziós állandón kívül a  $j_s$  áramot is. Valóban, ha összehasonlítjuk a (II.35) és a (II.31) áram-kifejezéseket, látható, hogy a (II.35)-ben az  $u_0^2$ -et tartalmazó tag is elmaradt, jóllehet az nem tartalmazza a diffúziós állandót. Egyszerű meggyőződni, hogy a  $D_n \varrho'_{n0}$  tag elhanyagolása valójában két közelítést jelent: egyrészt a diffúziós tagok elhagyását az áramból, másrészt az  $|u_0/v_0| \ll 1$  feltevést. Mivel a (II.33) legnagyobb gyöke  $x^{(\text{IV})} \approx 1/\alpha_d$ , vagyis  $u_0^{(\text{IV})} \approx -v_0$ , az  $|u_0/v_0| \ll 1$  azt jelenti, hogy a domén sebesség sokkal kisebb, mint az elektronok drift-sebessége a csúcstérnél.

A (II.35) közelítéssel az  $x$ -re harmadfokú algebrai egyenlet adódik:

$$\begin{aligned}a'_3 x^3 + a'_2 x^2 + a'_1 x + a'_0 &= 0 \\ a'_3 &= \alpha_d \alpha_3 - \alpha_0, \\ a'_2 &= \alpha_d \alpha_3 - \alpha_0 - \alpha_d K - \alpha_0 \alpha_r \gamma_r, \\ a'_1 &= -\alpha_d K_1 - \alpha_g K_2 - \alpha_0 \alpha_r \gamma_r, \\ a'_0 &= -\alpha_g K_2.\end{aligned}\tag{II.36}$$



A (II.36)-nak  $x = -1$  pontos gyöke. Az ennek megfelelő doménsebességet  $u_0^{(II)}$ -vel jelölve kapjuk:

$$u_0^{(II)} = -\frac{D_n}{v_0 \tau_0}. \quad (\text{II.37})$$

A (II.37) pontos gyöke a (II.36)-nak, de nem az eredeti egyenletnek. Ez a tény azért fontos, mert  $u_0 = u_0^{(II)}$  esetén  $M_0 + L_0 = 0$  és így a  $q_n$ -nek és deriváltjainak szingularitása lenne a neutrális pontban. A szingularitás azonban eltűnik, ha a  $q_{n0}$ ,  $q_{n0}'$ -ben is figyelembe vesszük az  $|u_0/v_0| \ll 1$  feltevést. Ez egyben a  $q_n$  analitikus tulajdonságaira ad megnyugtató választ. Az  $x^{(II)} = -1$  mellett a további két gyököt az

$$(\alpha_d \alpha_3 - \alpha_0) x^2 - (\alpha_d K_1 + \alpha_0 \alpha_r \gamma_r) \cdot x - \alpha_g K_2 = 0 \quad (\text{II.38})$$

egyenlet adja.

A legkisebb domén-sebességet  $u_0^{(I)}$ -el jelölve kapjuk:

$$-u_0^{(I)} = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 \frac{1 + \frac{D_n S_3}{v_0 S_2} + \frac{\gamma_r D_n \tau_0}{v_0^2 \tau_{M0} \tau_{r0}}}{1 - v_0 \tau_0 \frac{S_3}{S_2} - D_n \tau_0 \frac{S_4}{S_2} + D_n \tau_0^2 \tau_{r0}^{-1} \gamma_r \frac{S_2}{S_0} + \frac{\tau_0^2}{\tau_g \tau_{M0}}} \quad (\text{II.39})$$

Azt, hogy miért a legkisebb domén-sebességet azonosítom a valódi domén-sebességgel, a későbbiekben indokolom.

Mielőtt a domén-sebesség fenti kifejezésének következményeit diszkutálnám, a következő megjegyzést szükséges tenni. Az a tény, hogy a (II.39) szerint a domén-sebesség függ a domén alakjától, az alkalmazásoknál óvatosságra kell, hogy intsen. Így pl. ha az  $u_0$  csúcstértől való függésére vagyunk kíváncsiak, emlékeznünk kell arra, hogy maguk a domén-alak-paraméterek is függhetnek az  $E_0$ -tól, pontosabban a mintára kapcsolt feszültségtől. Nincs olyan elv, amely kimondaná, hogy a domén — amely a mintára kapcsolt feszültséget „felveszi” — alakváltozás nélkül teszi ezt. Ezt a kérdést az III. 3. pontban részletesen vizsgálom, amikor a DAP-módszerrel kapott kifejezéseket összehasonlítom a kísérleti eredményekkel. A domén alakjának pontos ismeretéhez meg kellett volna oldani (legalább is numerikusan) a (II.27) nemlineáris differenciálegyenletet. Ennek hiányában felteszem, hogy a domén alakját a *neutrális pont* körül bizonyos, önkényesen választott függvénnyel írhatom le és vizsgálom ennek következményét  $u_0$ -ra és  $j_s$ -re.

*Sík-domén.* Az összes  $S_i$  zérus. A domén-sebesség határozatlan marad. A [II.10]-ben közölt analitikus vizsgálat szerint ilyen domén nem létezik.

*Közel sík-domén.*  $S_2 = 0$ ,  $S_3 = 0$ ,  $S_4 \neq 0$ . Mint korábban megállapítottuk, ilyenkor egyetlen zérustól különböző domén-sebesség adódik, s az megegyezik  $u_0^{(II)}$ -val, azaz  $-u_0^{(II)} = D_n/v_0 \tau_0$ .

*Gauss-függvénnyel leírható domén* esetén a csúcstér körül  $E = E_0 \exp \left[ -\left( \frac{z}{d} \right)^2 \right]$ . Ezt a lehetőséget azért célszerű vizsgálni, mert [II.11]-ben a Riemann-féle megoldást meghatározó egyenletek linearizálásával éppen Gauss-függvénnyel leírható domén-alakot kaptak.



Egyszerű számítás adja:

$$-u_{0G}^{(I)} = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 \frac{1 + \frac{\gamma_\tau D_n \tau_0}{v_0^2 \tau_{M0} \tau_{r0}}}{1 + \frac{6 D_n \tau_0}{d^2} - \frac{2 D_n \tau_0^2 \gamma_\tau}{d^2 \cdot \tau_{r0}} + \frac{\tau_0^2}{\tau_g \tau_{M0}}} \quad (\text{II.40})$$

Tegyük fel, hogy a domén-szélesség  $d$  elég kicsiny és így a nevezőben a diffúziós tagok dominálnak. Hasonlóan, a számlálóban szereplő diffúziós tagról is feltesszük, hogy nagyobb az egységnél, ekkor kapjuk, a  $\tau_0 \approx \tau_{r0}$  közelítéssel:

$$d = \sqrt{3 - \gamma_\tau} \left( \frac{2 |u_{0G}^{(I)}| v_0 \tau_{M0} \tau_g}{\gamma_\tau} \right)^{1/2} \quad (\text{II.40}')$$

a [II.11]-ben levezetett kifejezéshez hasonló összefüggést ad a domén-sebesség és a domén-szélesség között. Van azonban két különbség a [II.11]-ben levezetett kifejezéshez képest: ott a  $3 - \gamma_\tau$  helyett 1 áll, másrészt ott minden mennyiséget a „kvázi-neutrális” közelítésnek megfelelően egy átlag-térnél kell venni. Mivel a szokásos értéknél  $\gamma_\tau \approx 2$ , a szám-faktor nem lényeges. Lényegesebb, hogy a (II.40) levezetésénél nem tételeztem fel, hogy a domén kis perturbáció és így megadja a kvázi-lineáris elmélet pontos alkalmazhatósági körét. Mint a III.3. pontban látni fogjuk a (II.40') által megjósolt  $d^2 \sim |u_{0G}^{(I)}|$  összefüggést a kísérletek nem igazolják.

*Kvadrátikus domén-alak.* Tanulságos megvizsgálni azt az esetet, amikor a szimmetrikus domén egyszerű kvadrátikus függvénnyel írható le a neutrális pont körül, azaz  $E = E_0 \left( 1 - \left( \frac{z}{d} \right)^2 \right)$ . Ekkor egyetlen alaktól függő tag lép fel a (II.39) nevezőjében:

$$-u_{0q}^{(I)} = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 \frac{1 + \frac{\gamma_\tau D_n}{v_0^2 \tau_{M0}}}{1 - \frac{2 D_n \tau_0 \gamma_r}{d^2} + \frac{\tau_0^2}{\tau_g \tau_{M0}}} \quad (\text{II.41})$$

Könnyű látni, hogy a domén-alakot tartalmazó tag, elég széles domén esetén elhanyagolható, és ekkor az általam kapott domén-sebesség (a számlálóban szereplő  $\gamma_\tau$  korrekciós faktortól eltekintve) megegyezik Ridley által a lineáris elméletből levezetett sebesség-kifejezéssel (lásd (II.10) formula). A hasonlóság szembeötlő lesz, ha megjegyezzük, hogy az itt bevezetett  $\tau_{M0}$  és a (II.10)-ben szereplő  $\tau_{Ms}$  között a következő összefüggés van:  $\tau_{M0} = \frac{\tau_0}{\tau_g} \tau_{Ms}$ , mivel  $\tau_{M0}$ -ban  $q_0$  szerepel, míg  $\tau_{Ms}$ -ben a  $q_{ns}$ .

A lényeges különbség ismét az, hogy most nem tételeztük fel a linearitást és a Ridley-féle formulával szemben nem a doménon kívüli kis térerősségnél kell kiszámítani a szereplő mennyiségeket, hanem a nagy térerősségű domén maximumánál.

Meglepő, hogy a két elmélet formailag ennyire hasonló kifejezést ad, jóllehet lényegesen különböző módszert használ.

Joggal vetődik fel a kérdés: *nem lehetséges-e az, hogy a nagytérerősségű domén alakja éppen úgy alakul, hogy az általános (II.39) nevezőjében szereplő domén-alak-*



paraméterek éppen megsemmisítik egymást? Ezt egyetlen ellenpélda is cáfolja, amit a III.1. pontban mutatok be, ahol a megfelelően általánosított modellből számított kifejezéseket összehasonlítom Milnes számítógépes módszerrel kapott eredményeivel.

Mielőtt rámutatok arra a fizikai feltevésre, amely alak-független domén-sebességhez vezet, vizsgáljuk meg a (II.39) várható következményeit.

Vizsgáljuk meg a domén-alak-paraméterek  $\alpha_0, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ , várható nagyságát. Mint láttuk, szimmetrikus domén esetén  $\alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0$ . Ha becslésként  $\left| \frac{S_3}{S_2} \right| \approx \frac{1}{d}$  értéket veszünk, ahol  $d$  pl. a domén-szélesség nagyságrendjébe esik, akkor  $|\alpha_2| \approx \frac{v_0 \tau_0}{d}, |\alpha_3| \approx \frac{D_n}{v_0 d}$  és látható, hogy  $d$  szokásos értékénél ( $d \approx 10^{-2}$  cm)  $|\alpha_3| \ll 1$ , (mindig elhanyagolható), míg  $|\alpha_2| \gg 1$ . Az  $\alpha_2$ -t „aszimmetria-paraméternek” lehet nevezni, és könnyű belátni, hogy a domén kis aszimmetriája esetén is lényegesen befolyásolhatja a domén-sebességet. A fenti becslésen túlmenően célszerű a domén alakját empirikus függvényekkel leírni és megvizsgálni az így adódó domén-sebességeket. Itt egyetlen egyszerű esetet vizsgálók. Tegyük fel, hogy a domén a neutrális pontja körül úgy viselkedik, mint az  $y = \left(\frac{x}{d}\right)^r \cdot e^{-\frac{x}{d}}$  függvény a maximuma körül. Ekkor

$$\frac{S_3}{S_2} = -\frac{2}{rd}, \quad \frac{S_4}{S_2} = -\frac{3}{rd^2} \left(1 - \frac{2}{r}\right)$$

és mivel (II.39) nevezőjében az aszimmetria paraméter dominál, az erősen *aszimmetrikus domén*  $u_{0a}^{(I)}$ -sebességére kapjuk:

$$-u_{0a}^{(I)} = \frac{rd}{2\tau_g} \left(1 + \frac{\gamma_\tau D_n}{v_0^2 \tau_{M0}}\right) \quad (\text{II.42})$$

Ez a kifejezés (II 40')-vel ellentétben (rögzített  $r$  mellett) lineáris kapcsolatot jósol a domén ( $u_0$ ) sebessége és szélessége ( $d$ ) között.

#### Kvázi-egyensúly a sáv és a rekombinációs centrumok között

Az eddigiek alapján világos, hogy a rekombinációs domének kialakulása a  $\tau_r(E)$  függvény azon tulajdonságával kapcsolatos, hogy növekvő térerősséggel a  $\tau_r(E)$  élettartam csökken. Elképzelhető az az eset, amikor  $\tau_r$  már kisebb lesz a probléma többi karakterisztikus idejénél és ekkor a nagytererősségű domén belsejében *lokális egyensúly* tételezhető fel a sáv és a centrumok között. Kérdés, hogy ilyenkor mi lesz a domén sebessége és az áram, amely a stacioner domén-mozgás ideje alatt folyik. A (II.28) egyenletek kapcsán már említettem, hogy ez a lokális egyensúly csak közelítés, mert egzaktul csak a szinguláris pontokban igaz, mégis célszerű e feltételezés következményeit vizsgálni. A lokális egyensúly a  $\Psi_1 \equiv 0$  feltételt jelenti, azaz:

$$\frac{Q_2}{Q_n} = \frac{\tau_g}{\tau_r},$$



ami alapján a (II.26)-nek megfelelő egyenletek:

$$Q_n = \frac{\tau}{\tau_g} T; \quad Q_2 = \frac{\tau}{\tau_r} T \quad (\text{II.43})$$

Az egyes betűk jelentését korábban megadtam. A fenti kifejezések annyiban egyszerűbbek a (II.26)-hoz képest, hogy most  $Q_n$  és  $Q_2$  már az  $E$  és  $E'$  függvényekkel kifejezhetők, míg általános esetben az  $E''$  is fellépett. Az általános eset számításánál járt utat használva most egyszerű kifejezések adódnak a  $j_s$  és  $u_0$  mennyiségekre:

$$j_s = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 Q_0 - \frac{\tau_0}{\tau_g} D_n S_2 \quad (\text{II.44})$$

$$-u_0 = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 + \frac{\gamma_\tau D_n \tau_0}{v_0 \tau_{M0} \tau_g} + \frac{S_3}{S_2} \cdot \frac{\tau_0 D_n}{\tau_g}. \quad (\text{II.45})$$

A (II.45) második tagjában a  $\tau_0 \approx \tau_{r0}$  közelítést használtam. Mint látjuk, az áram kifejezésében nem lép fel a  $\tau_0 u_0 v_0 S_2$  tag, másrészt a sebesség közvetlenül adódik, ha  $S_2 \neq 0$ .

Két megjegyzés szükséges a fenti kifejezésekkel kapcsolatban. Először, hogy a (II.45) a  $\gamma_\tau$  korrekciós faktortól és az általában kicsiny  $\frac{S_3 \tau_0 D_n}{S_2 \tau_g}$  tagtól eltekintve megegyezik a [II.9] dolgozatban levezetett sebesség kifejezéssel. A másik megjegyzés, hogy a lokális egyensúly feltételezése alapján levezetett (II.45) kifejezés már nem tartalmazza azokat az alak-érzékeny paramétereket, amelyek az általános (II.39) kifejezés nevezőjében fellépnek. Az  $u_0$ -ra vonatkozó fenti kifejezés pontosan megegyezik az általános (II.39) kifejezés számlálójával. Másszóval *a lokális egyensúly következménye, hogy a domén-mozgás lokális tulajdonsággá válik, független lesz a domén alakjától.* Az  $\alpha_3$  paraméter elhanyagolható az egység mellett és ugyancsak elhanyagolható az áram kifejezésében fellépő  $\frac{\tau_0}{\tau_g} D_n S_2$  tag is a drift-tag mellett. Figyelembe véve a szereplő mennyiségek szokásos értékét, a két mennyiségre az adott feltételezések mellett írhatjuk:

$$j_s = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 Q_0; \quad -u_0 = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0$$

ahonnan a következő fontos összefüggés adódik:

$$j_s = -u_0 Q_0 \quad (\text{II.46})$$

ami nyilvánvalóan azt jelenti, hogy az áram és a domén-sebesség arányos egymással. Ezt az összefüggést alapvetőnek tekintik a rekombinációs domének elméletében és azt a kísérleti tényt, amely pl. igazolta azt, hogy  $u_0$  és  $j_s$  azonos hőmérséklet-függést mutat, úgy tekintik, mint a (II.46) közvetlen igazolása. Ugyanakkor világos, hogy a (II.46) *nem magyarázhatja azt a tényt, hogy  $j_s$  és  $u_0$  különböző feszültség-függést mutat;* ugyanis  $j_s$  érzéketlen a mintára kapcsolt feszültségre, míg az  $u_0$  növekvő feszültséggel nő, hasonlóan a domén szélességével. Az általános tárgyalásból azonban kitűnik, hogy a (II.46) nem érvényes minden további nélkül, hanem éppen a lokális egyensúly következménye. A (II.39) által megadott általános domén-alak-



paraméterektől függő sebességet és az ugyancsak alaktól függő (II.35) áramot általában nem lehet — konstans  $k$  mellett —  $|u_0| = k j_s$  alakban írni, hiszen a domén-alak-paraméterek függhetnek a mintára kapcsolt feszültségtől.

A másik kérdés a domén-sebesség abszolút értékének kérdése. Mint látni fogjuk, a legmegbízhatóbb mérések alapján a szokásos kifejezésekkel számolt domén-sebességek gyakran több, mint két nagyságrenddel nagyobbak adódnak a megfigyelt értékeknél. Ezt a kérdést a csapdák hatásának elemzése nélkül nem lehet meggyőzően vizsgálni, ezért a kísérleti tényekkel való összehasonlítást későbbre hagyom.

Minden esetre az látható, hogy az általam levezetett domén-sebesség kifejezésből speciális esetként megkaphatók az eddig explicite felírt domén-sebességek és meghatározhatóak azok a feltételek, amelyek teljesülése esetén azok érvényesek. A tárgyalás során azzal az egyszerűsítéssel éltem, hogy a rekombináció kinetikáját leíró egyenleteket linearizáltam a koncentrációkra nézve. E feltevés nélkül a II. 4. pontban tárgyalom a rekombinációs doméneket.

## II. 2b. A DAP-módszer alkalmazása a Gunn-effektusra

Az általános „két-állapot” modellben vizsgáljuk a stacionerén mozgó Gunn-doméneket, az előzőekben leírt módszer segítségével. Most az (I.6)–(I.9) egyenletekből kell kiindulni feltételezve, hogy a Riemann-féle megoldás létezik. Lényeges, hogy  $j = j_1 + j_2$  áramsűrűséget használva, a teljes áram változatlanul konstans marad, azaz a (II.20) összefüggés érvényes. A szereplő  $q_1$ ,  $q_2$ ,  $E$  függvényekre a következő differenciálegyenlet-rendszer adódik:

$$j' = u_0 q' = \frac{u_0 \varepsilon E''}{4\pi} \quad (\text{II.47})$$

$$j = \frac{u_0 \varepsilon E'}{4\pi} + j_s \quad (\text{II.48})$$

$$E' = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_1 - q_2) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} q \quad (\text{II.49})$$

$$u_0 q'_1 + j'_1 = \Psi_{12} \quad (\text{II.50})$$

$$u_0 q'_2 + j'_2 = -\Psi_{12}$$

A stacioner domén-mozgás teljes leírásához a fenti egyenletrendszert kellene megoldani, figyelembe véve az egész minta elektromos semlegességét és a Kirchhoff-törvényt.

Mint a rekombinációs instabilitás esetében, most is két lehetőség van. Az egyiknél a két állapot közötti átmenetek „pillanatszerűen” mennek végbe, azaz kvázi-egyensúly van a két különböző mozgékonyaságú állapot között ( $\Psi_{12} \equiv 0$ ), a másik lehetőség, hogy explicite figyelembe vesszük a különböző mozgékonyaságú állapotok kinetikáját ( $\Psi_{12} \neq 0$ ). (Most nem célszerű a lokális egyensúly elnevezés, mert az alacsony mozgékonyaságú állapotok nem lokalizáltak.)

A két esetet külön kell vizsgálni, hiszen láttuk, hogy a kvázi-egyensúly feltételezése a rekombinációs doméneknél lényeges tagok elhanyagolásához vezetett.



### Kvázi-egyensúly a völgyek között

Az eljárás most is az, hogy meghatározzuk a  $q_i(z)$  függvényeket az  $E(z)$  és deriváltjai segítségével. A kvázi-egyensúly miatt (I.9) alapján írhatjuk:

$$\frac{q_2}{q_1} = \frac{\tau_g}{\tau_r(E)} \equiv r(E)$$

és így (II.49) alapján

$$q_1 = \frac{T}{1+r(E)}; \quad q_2 = \frac{r(E)T}{1+r(E)}, \quad (\text{II.51})$$

ahol  $T = q_0 - \frac{\varepsilon E'}{4\pi}$ , a teljes negatív töltéssűrűség. Ismét látható, hogy míg a  $q_2/q_1$  hányados csak a térerősség függvénye, külön-külön a  $q_1$ ,  $q_2$  sűrűségek az  $E$  és  $E'$ -től is függenek.

Az  $E(z)$ -re vonatkozó differenciálegyenlet azonnal felírható, ha (II.51)-et behelyettesítjük a (II.48) egyenletbe [II.23]. A  $j_s$  áram és  $u_0$  domén-sebesség igen egyszerűen meghatározható a (II.47) és (II.48) egyenletek alapján, ha azokat a  $z_0$  neutrális pontban vesszük. A  $j_i$ -ben szereplő  $q_i$  és  $q'_i$  deriváltak (lásd (I.7) kifejezést) a (II.51) alapján kiszámíthatók. Feltételezve, hogy a csúcstérnél  $E''_0 \neq 0$ ,  $j_s$ -re és  $u_0$ -ra kapjuk:

$$j_s = v_{a0}q_0 - D_{a0}S_2 \quad (\text{II.52})$$

$$-u_0 = v_{a0} + \frac{\gamma_r r_0 (D_{10} - D_{20})}{\tau_{M0} v_{10} (1 + r_0)^2} - \frac{\dot{D}_{a0} E_0}{\tau_{M0} v_{10}} + \frac{D_{a0} S_3}{S_2} \quad (\text{II.53})$$

ahol

$$v_{a0} = \frac{v_{10} + r_0 v_{20}}{1 + r_0}; \quad D_{a0} = \frac{D_{10} + r_0 D_{20}}{1 + r_0} \quad (\text{II.54})$$

$$\dot{D}_{a0} = \frac{\dot{D}_{10} + r_0 \dot{D}_{20}}{1 + r_0}$$

$$\tau_{M0} = \frac{\varepsilon}{4\pi q_0 \mu_{10}}; \quad \gamma_r = \frac{E_0}{r_0} \left( \frac{dr}{dE} \right)_0 = -\frac{E_0}{\tau_{r0}} \left( \frac{d\tau_r}{dE} \right)_0. \quad (\text{II.54}')$$

A (II.52)–(II.53) egyenletek úgy tekinthetők, mint a (II.44)–(II.45) általánosításai arra az esetre, amikor az alacsony-mozgékonyosságú állapotokban a mozgékonyosság zérustól különbözik, de a mozgékonyosság és a diffúziós együttható is függ a térerősségtől.

A  $j_s$  és  $u_0$  között a diffúziós tagok elhanyagolásával ismét a  $j_s = -u_0 q_0$  összefüggés adódik [II.16], [II.17], [II.33]. A fenti egyenlettől való eltérés megbecsülhető a (II.53)-ban szereplő mennyiségek ismeretében.

A nagyságrendi becsléshez a következő értékeket használhatjuk [II.31];  $\mu_1 = 8 \cdot 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$ ;  $\mu_2 = 200 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$ ,  $D_1 = 240 \text{ cm}^2/\text{sec}$ ,  $D_2 = 60 \text{ cm}^2/\text{sec}$ ,  $B = 0,025$ ;  $\varepsilon = 12,5$ ;  $q_0/q = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  vagy  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , és ennek megfelelően  $\tau_{M0} = 8,62 \cdot 10^{-12} \text{ sec}$  vagy  $8,62 \cdot 10^{-13} \text{ sec}$ . Az  $r(E)$  függvényt gyakran elegendő  $r(E) = (E/E_c)^K$  alakban írni [II.35], ahol  $E_c = 4,3 \cdot 10^3 \text{ V/cm}$ ,  $K = 2$ . További adatok:  $\tau_g = 5 \cdot 10^{-12} \text{ sec}$ ,  $\tau_{r0} \approx \tau_0 = 5 \cdot 10^{-14} \text{ sec}$ , ha  $E_0 = 10E_c$ .



Ennek alapján belátható, hogy a  $v_{a0}$  mellett a  $(D_{10} - D_{20})$ -t és a  $\dot{D}_{a0}$ -t tartalmazó tag ad lényeges járulékot. Ezek együtt formailag megegyeznek azzal a kifejezéssel, amely akkor adódik, ha a Gunn-effektust leíró autonóm differenciálegyenlet-rendszer  $E_2$  szinguláris pontjától megköveteljük, hogy centrum legyen. A különbség annyi, hogy most minden mennyiséget a csúcstérnél kell venni, nem az  $E_2$  szinguláris pontban. Hasonló korrekciós tagot vezettek le [II.15]-ben, azzal a különbséggel, hogy ott nagy amplitúdójú domén esetén, a teljes doménen-belüli tér-eloszlás ismerete szükséges, és explicite csak kis amplitúdójú doménre írták fel a (II.53) kifejezést, míg az általam használt módszer segítségével nagy amplitúdójú domén esetén is azonnal látható, hogy a domén-alaktól függő tag — tehát a térerősség eloszlás hatása — elhanyagolható.

A fenti eredmény következménye, hogy a domén-sebesség csúcstér-függése közvetlenül vizsgálható a (II.53) alapján.

Természetesen felvetődik az ellenvetés: vajon a völgyek közötti átmenetek karakterisztikus ideje elég kicsiny-e ahhoz, hogy pl. a domén-alak-paraméterek elhanyagolhatók legyenek? Ehhez meg kell vizsgálni azt, hogy a völgyek közötti átmenetek kinetikáját is figyelembe véve, hogyan módosulnak az áram és sebesség kifejezések.

#### *A völgyek közötti átmenetek hatása a Gunn-domének mozgására*

A számítás most lényegesen bonyolultabb, hiszen a völgyek közötti átmeneteket leíró  $\Psi_{12}$  függvény nem azonosan zérus és így a  $q_i$  sűrűségek  $E$  magasabb deriváltjaitól is függenek. A következő egyszerűsítéssel élünk: feltesszük, hogy  $\mu_i$ ,  $D_i$  ( $i=1,2$ ) állandók, és mindkét völgyben érvényes az Einstein-reláció a következő alakban  $\mu_i/D_i = h_0$ . Nem jelent lényeges nehézséget e feltételek nélkül számolni, azonban mint látni fogjuk, céljainknak ez a közelítés teljesen elegendő.

Először a  $q'_i$ -t kell kifejezni a (II.48) segítségével és a Poisson-egyenlet differenciálásával. Ezután a (II.50) egyenletek és a Poisson-egyenlet ismételt differenciálásával a  $q''_i$  is kifejezhető  $E$  és deriváltjai, valamint a  $q'_i$  függvényekkel. Ezek segítségével már megkaphatjuk a keresett  $q_i = q_i(E, E', E'', E''')$  függvényeket:

$$q_1 = \frac{R + TM}{L + M}; \quad q_2 = \frac{-R + TL}{L + M} \quad (\text{II.55})$$

ahol

$$R = \frac{D_1 D_2 \varepsilon E''}{4\pi} + \left( j_s + \frac{\varepsilon E' u_0}{4\pi} \right) u_0 + \left[ u_0 (D_1 + D_2) + \frac{E(D_1^2 \mu_2 - D_2^2 \mu_1)}{D_1 - D_2} \right] \frac{\varepsilon E''}{4\pi}$$

$$L = D_2 \mu_1 E' + u_0 \mu_1 E + \frac{1}{\tau_r} (D_1 - D_2)$$

$$M = -D_1 \mu_2 E' - u_0 \mu_2 E + \frac{1}{\tau_g} (D_1 - D_2)$$

$$T = q_0 - \frac{\varepsilon E'}{4\pi}$$

A számítást a rekombinációs instabilitásnál használt eljárással folytathatjuk. A



(II.47) és (II.48)-ból  $u_0$ -ra és  $j_s$ -re egyenletrendszer adódik, ha azt a neutrális pontba vesszük, és a szükséges függvények értékét a (II.55) alapján kiszámítjuk. A meg lehetőségei hosszadalmas számolást mellőzöm. Elegendő azt a végformulát felírni, amit a szóban forgó harmadfokú egyenlet közelítő gyökeként kapunk [II.23]. Most célszerű a  $\xi_0 = u_0/v_{10}$ , ( $v_{10} = \mu_i E_0$ ) dimenziótlan sebességre felírni az algebrai egyenletet. A  $\mu_1$  és  $E_0$  nagyságrendjét ismerve (pl. GaAs esetén  $\mu_1 = 8000 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$ ;  $E_0 = 5 \cdot 10^4 \text{ Vcm}^{-1}$ ;  $v_{10} = 4 \cdot 10^8 \text{ cm/sec}$ , míg a domén-sebesség  $|u_0| \approx 10^7 \text{ cm/sec}$  nagyságrendű).  $\xi_0$ -ban csak a legkisebb gyököket keressük meg és ezt azonosítjuk a domén-sebességgel. A következő áram és sebesség kifejezés adódik:

$$j_s = \frac{Q_0 v_{10}}{\alpha_d \alpha_M} [K'' + \bar{\alpha}_0 (1+B) \xi_0] \quad (\text{II.56})$$

$$-u_0^{(II)} = \frac{v_{10} \alpha_d (K' + \gamma_r \alpha_r K'')}{\alpha_d \cdot P' + K'' + \gamma_r \bar{\alpha}_0 \alpha_d \alpha_r (1+B)} \quad (\text{II.57})$$

ahol a következő jelöléseket vezettem be:

$$\begin{aligned} P' &= 1 - (\alpha_2 + \alpha_4) (1+B) \\ K' \alpha_g (1+r_0 B) + B [\alpha_M (1+\alpha_3) - \gamma_r \alpha_d \alpha_r \alpha_M - 3\bar{\alpha}_0 - \alpha_2 - 2\alpha_4 - \alpha_5] \\ K'' &= \alpha_d \alpha_g \alpha_M (1+r_0 B) + \bar{\alpha}_0 B (1+\alpha_3). \end{aligned} \quad (\text{II.58a})$$

Az egyes betűk a rekombinációs instabilitásnál bevezetett dimenziótlan mennyiségekhez hasonlóak, kivéve az  $\bar{\alpha}_0$ -t, amely azért különbözik a (II.34)-nél bevezetett mennyiségtől, mert itt az  $u_0/v_{10}$  dimenziótlan sebességre írtam fel az algebrai egyenletet, valamint, hogy minden mennyiséget, ahol korábban a  $v_0$  sebesség lépett fel a  $v_{10}$ -et, és ahol a  $D_n$ , ott  $D_1$ -et vezettem be. Ennek megfelelően:

$$\begin{aligned} B &= D_2/D_1 = \mu_2/\mu_1 \\ \alpha_r &= \tau_0/\tau_{r0}; \quad \alpha_g = \tau_0/\tau_g; \quad \alpha_M = \tau_0/\tau_{M0} \\ r_0 &= \tau_g/\tau_{r0}; \quad 1/\tau_0 = 1/\tau_{r0} + 1/\tau_g \\ \bar{\alpha}_0 &= D_1 \tau_0 S_2/S_0; \quad \alpha_d = D_1/v_{10}^2 \tau_0; \quad \alpha_2 = v_{10} \tau_0 S_3/S_2 \\ \alpha_3 &= D_1 S_3/v_{10} S_2; \quad (\alpha_d \alpha_2 = \alpha_3); \quad \alpha_4 = \tau_0 D_1 S_4/S_2 \\ \alpha_5 &= D_1^2 \tau_0 S_5/v_{10} S_2. \end{aligned} \quad (\text{II.58b})$$

A most levezetett (II.57) kifejezésről könnyű belátni, hogy az, a korábban kapott (II.39) formula általánosítása arra az esetre, amikor az alacsony mozgékonyágú állapotokban a mozgékonyág nem azonosan zérus. Ha (II.57)-ben  $B=0$ -t írunk, akkor  $P' \rightarrow 1 - \alpha_2 - \alpha_4$ ;  $K' \rightarrow \alpha_g$ ;  $K'' \rightarrow \alpha_d \alpha_g \alpha_M$  és ha még a  $v_{10} \rightarrow v_0$  jelölést is bevezetjük, akkor valóban visszakapjuk (II.39)-et. A (II.56) áramkifejezés is azonnal átmegy a (II.35) formulába, ha  $B=0$ -t helyettesítünk és figyelembe vesszük, hogy  $\alpha_0$  és  $\bar{\alpha}_0$  között a következő összefüggés érvényes:  $\alpha_0 = \bar{\alpha}_0 D_1/v_{10}^2 \tau_0$ , továbbá, ha még  $v_{10} \rightarrow v_0$ -t is írunk. Mielőtt a domén-alak-paramétereket tartalmazó kifejezéseket megvizsgál-nánk, írjuk fel az alak-paraméterektől független sebesség kifejezést. Azonnal látható, hogy

$$\begin{aligned} K' &\approx \alpha_g (1+r_0 B) + B \alpha_M - \gamma_r \alpha_d \alpha_r \alpha_M \\ P' &\approx 1; \quad K'' \approx \alpha_d \alpha_g \alpha_M (1+r_0 B) \end{aligned}$$



és néhány egyszerű azonosságot felhasználva (pl.  $\alpha_g = (1 + r_0)^{-1}$ ):

$$-u_0^{(II)} \approx v_{10} \frac{\alpha_g(1 + r_0 B) + \gamma_r \alpha_d \alpha_g \alpha_M \alpha_r (1 - B) + B \alpha_M}{1 + \alpha_g \alpha_M (1 + r_0 B)} \quad (\text{II.59})$$

Eltekintve attól a közelítéstől, hogy  $D_i, \mu_i = \text{konstans}$  és így a  $\dot{D}_i$ -nak megfelelő tag nem lép itt fel, látható, hogy melyek azok a dimenziótlan mennyiségek, amelyeknek kicsinyeknek kell lenniük, hogy a kvázi-egyensúly feltételezése igaz legyen. Írjuk be a szereplő mennyiségek értékét, figyelembe véve  $v_{a0}$  és  $D_{a0}$  definícióját, valamint, hogy  $v_{10} B = v_{20}$ ;  $\alpha_r \approx 1$  és így:

$$-u_0^{(II)} \approx \frac{v_{a0} + \frac{\gamma_r r_0 (D_1 - D_2)}{v_{10} \tau_{M0} (1 + r_0)^2} + v_{20} \frac{\tau_0}{\tau_{M0}}}{1 + \frac{\tau_0}{\tau_{M0}} (1 + r_0 B) (1 + r_0)^{-1}} \quad (\text{II.59})$$

Innen látható, hogy  $\tau_0/\tau_{M0} \ll 1$  kell legyen. Valóban, ha  $E_0$  elég nagy, úgy  $r_0 \gg 1$  és így  $v_{a0} \approx v_{20}$ , azaz a számlálóban  $v_{20} \left(1 + \frac{\tau_0}{\tau_{M0}}\right)$  áll. Emlékeznünk kell még arra, hogy a  $D_i$ -ket állandónak tekintettük. Ha ez nem érvényes, akkor a völgyek közötti szórás miatt fellépő  $v_{20}$  mellett a  $-\dot{D}_{a0} E_0 / \tau_{M0} v_{10}$  is szerepel. Igen egyszerű belátni, hogy a Gunn-effektus esetén — legalábbis GaAs-ra és nem túl kis domén-szélességre — az összes domén-alak-paraméter elhanyagolható járulékot ad a sebességhez.

Valóban, a kísérletek szerint kis csúcstereknel a domén csaknem kvadratikusan [II.18]. Ekkor csak  $\bar{\alpha}_0$  lép fel, amelyre  $d > 40 \mu\text{m}$  esetén az adódik, hogy  $|\bar{\alpha}_0| < 4 \cdot 10^{-6}$ . Növelve a csúcstér értékét, a domén aszimmetrikussá válik, sőt, háromszög-alakot is fel lehet tételezni. Nagyságrendi becsléshez elegendő feltenni, hogy

$$\left| \frac{S_{i+1}}{S_i} \right| \approx \frac{1}{d}; \quad \left| \frac{S_2}{S_0} \right| \approx \frac{1}{d^2}$$

ahol  $d$  a domén „félszélessége”. Egyetlen paraméter lehet számottevő, az  $\bar{\alpha}_0, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5$ , mennyiségek között, az  $\alpha_2$  asszimmetria paraméter. Felhasználva a szokásos  $v_{10}, \tau_0$  értékeket, és  $d \approx 20 \mu\text{m}$ -t írva, kapjuk  $|\alpha_2| \approx 0,01$ . A fentiek alapján mondhatjuk, hogy a Gunn-domének alaktól független sebességgel haladnak. Sebességük meghatározására a (II.59), vagy kvázi-egyensúly esetén a (II.53) formula használható.

### II. 3. A csapdák hatásának vizsgálata a DAP-módszer segítségével

A lassan mozgó térerősségű domének kísérleti vizsgálatok már Ridley felvetette annak lehetőségét, hogy a mintában levő idegen centrumok (csapdák) befolyásolhatják a domén sebességét. Ugyanez vonatkozik a Gunn-doménekre is, hiszen, ha a tértöltésnek lokalizált komponense van, akkor a domén-haladás jelentősen csökkenhet. Ezt a kérdést az újabban megjelent kísérleti tények figyelembevételével fogom elemezni a III. fejezetben, és mint látni fogjuk, az általam bevezetett paraméter, az alacsony és nagy mozgékonyaságú állapotokból való befogás karakterisztikus idejének hányadosa, alapvető a kísérletek interpretálásánál.



Van azonban egy további kérdés is: ha az idegen centrumokat figyelembe vesszük, magyarázható-e az a tény, hogy a mintára kapcsolt feszültség függvényében  $j_s$  közel állandó marad, míg a domén sebessége változik, azaz a (II.24)-ben szereplő  $k$  arányossági tényező tényleg független lesz. A fenti „kényszerítő” tények mellett önmagában is érdemes megvizsgálni a DAP-módszer használhatóságát bonyolultabb modellek esetén, hiszen várható, hogy pl. a csapdák által lelassult Gunn-domének már érzékenyek lehetnek a domén-alak-paraméterekre.

B. K. Ridley volt az első [II.36], aki a csapdák hatását elméletileg vizsgálta, azonban tárgyalásában — túlmenően azon, hogy lineáris elméletet használt — azzal az indokolatlan feltevéssel élt, hogy a felső és centrális völgyekből való befogás azonos értékű. Jelen tárgyalásban a nem-lineáris elmélet keretében vizsgálom a kérdést, a fenti egyszerűsítés nélkül.

A DAP-módszer végigvitele a csapdák jelenlétében meglehetősen hosszadalmas számításokat igényel, ezért igyekeztem olyan egyszerűsítésekkel élni, amelyek nem

jelentenek elvi megszorítást az effektus szempontjából, mégis lehetőséget adnak, hogy kezelhető kifejezéseket kapjunk a stacionerén mozgó domének viselkedésére csapdák jelenlétében is. A számolás során a következő egyszerűsítő feltevéseket használok [II.25]:

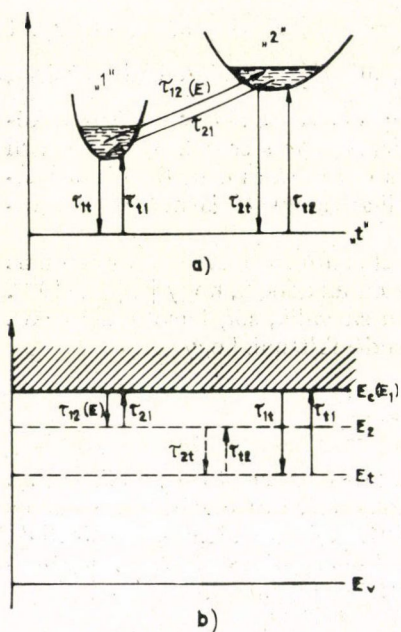
- csak a NDV-t eredményező relaxációs idő függ a tértől;
- e két állapot között kvázi-egyensúly van;
- a csapdákba való átmenet kinetikáját leíró egyenlet linearizálható a koncentrációkra nézve;
- a mozgékonyaságok és diffúziós együtthatók tértől függetlenek.

#### A két-állapot modell alapegyenletei csapdák jelenlétében

Az (I.1)–(I.4) — egyenletek kapcsán már említettem, hogy nem jelentene nehézséget az olyan irányú általánosítás, ahol a különböző mozgékonyaságú völgyek és a különböző „s” töltésállapotú centrumok jelenlétére is felírjuk a kiinduló egyenleteket. Ezt azért nem tettem, mert a gyakorlatban előforduló eseteknél elegendő két töltésállapot figyelembevétele, és ha még külön csapdák is vannak, akkor a kvázi-egyensúly feltételezése a NDV-hez vezető álla-

potok között várhatóan jó közelítést jelent. Ez utóbbi a dolog természetéből következik, hiszen a csapdák éppen lassítják a domén-mozgást, tehát lassúbb folyamatok feltételezését igényli.

Az II.1. ábrán láthatók azok az átmenetek, amelyek az általános két-állapot modellben fellépnek. Mivel az egyes karakterisztikus idők jelentése az ábra alapján



II.1. ábra. A két-állapot modell átmeneteinek sematikus ábrázolása, csapdák jelenlétében. Csak az 1 → 2 átmenet függ az E térerősségtől. a) Gunn-effektus, b) Rekombinációs instabilitás.



nyilvánvaló, csak egyetlen megjegyzést tesztek. A II. 1b ábrán a  $\tau_{2t}, \tau_{t2}$  relaxációs időnek megfelelő átmenetek szaggatottan vannak rajzolva. Ez azt jelzi, hogy a rekombinációs instabilitás esetén a két típusú lokalizált centrum közötti átmenetek elhanyagolhatóak, ami a szokásos centrum-koncentrációk mellett nyilvánvaló. A két fajta centrum közül az egyik a NDV-t eredményezi, a másik a domén-mozgást befolyásolja.

Az általános két-állapot modell alapegyenletei az „1”, „2” és „t” nívók között lehetséges átmeneteket veszi figyelembe:

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} - \frac{\partial j_1}{\partial x} = -\Psi_{12}(q_1, q_2, E) - \Psi_{1t}(q_1, q_t); \quad (i)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} - \frac{\partial j_2}{\partial x} = +\Psi_{12}(q_1, q_2, E) - \Psi_{2t}(q_2, q_t); \quad (ii)$$

$$\frac{\partial q_t}{\partial t} = \Psi_{1t} + \Psi_{2t}; \quad (iii)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_1 - q_2 - q_t) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} q_i \quad (iv)$$

$$j_i = q_i \mu_i E + D_i \frac{\partial q_i}{\partial x}; \quad (i = 1, 2), \quad (v)$$

$$\Psi_{12} = q_1/\tau_{12}(E) - q_2/\tau_{21},$$

$$\Psi_{1t} = q_1/\tau_{1t} - q_t/\tau_{t1}, \quad (vi)$$

$$\Psi_{2t} = q_2/\tau_{2t} - q_t/\tau_{t2}.$$

Változatlanul érvényes a  $q$  tértöltés és  $j = j_1 + j_2$  áramra az (I.10) egyenlet és ha Riemann-típusú megoldást keresünk, akkor a teljes áram ismét állandó lesz, a (II.20)-nak megfelelően. A  $z = x - u_0 t$  változót bevezetve, a következő egyenlet-rendszert kapjuk:

$$u_0 q'_1 + j'_1 = \Psi_{12} + \Psi_{1t}$$

$$u_0 q'_2 + j'_2 = -\Psi_{12} + \Psi_{2t}$$

$$u_0 q'_t = -\Psi_{1t} - \Psi_{2t} \quad (II.60)$$

$$E' = \frac{4\pi}{\varepsilon} (q_0 - q_1 - q_2 - q_t)$$

$$j' = u_0 q' = \frac{\varepsilon u_0 E''}{4\pi} \quad (II.61a)$$

$$j = u_0 q + j_s = j_s + \frac{\varepsilon u_0 E'}{4\pi} \quad (II.61b)$$

A c) feltevés alapján az „1” és „2” állapotok kváziegyensúlyban vannak, vagyis  $\Psi_{12} \equiv 0$ , és így:

$$\frac{q_2}{q_1} = \frac{\tau_{21}}{\tau_{12}(E)} \equiv r(E) \quad (II.62)$$



A további számolás a (II.61) egyenletekből indul ki. A neutrális pontban véve ezeket, kapjuk:

$$j_s = \varrho_{10}(v_{10} + r_0 v_{20}) + \varrho'_{10}(D_1 + r_0 D_2) \quad (\text{II.63a})$$

$$u_0 S_2 = \varrho'_{10}(v_{10} + r_0 v_{20}) + \varrho_{10} \dot{r}_0 D_2 E''_0 + \varrho''_{10}(D_1 + r_0 D_2), \quad (\text{II.63b})$$

ahol az egyes jelöléseket már a csapdák nélküli Gunn-effektus tárgyalásánál használtam.

Most a  $\varrho_i(E, E', \dots)$ , ( $i=1, 2, t$ ) függvényeket kell meghatározni, hogy (II.63)-ba helyettesítve a  $j_s$  és  $u_0$  kiszámítható legyen.

A (II.62) feltevés alapján ez a számítás viszonylag egyszerűen elvégezhető. A (II.60) és (II.61b) segítségével a  $\varrho'_1$  és  $\varrho'_t$  eliminálható és a  $\varrho_1$ ,  $\varrho_t$  függvényekre adódik:

$$\varrho_1(1+r) + \varrho_t = T \quad (\text{II.64})$$

$$L \cdot \varrho_1 - M \cdot \varrho_t = R$$

ahol

$$T = \varrho_0 - \varepsilon E' / 4\pi;$$

$$L = (v_1 + r v_2)(1+r)u_0 + (D_2 - D_1)u_0 \dot{r} E' + (D_1 + r D_2)(1/\tau_{1t} + r/\tau_{2t});$$

$$M = (D_1 + r D_2)/\tau_g; \quad \tau_g^{-1} = \tau_{1t}^{-1} + \tau_{2t}^{-1} \quad (\text{II.64'})$$

$$R = u_0[(1+r)(j_s + \varepsilon u_0 E' / 4\pi) - (D_1 + r D_2)T'].$$

Az egyenletrendszer megoldása:

$$\varrho_1 = \frac{R + TM}{L + (1+r)M}, \quad \varrho_t = \frac{-(1+r)R + TL}{L + (1+r)M}. \quad (\text{II.65})$$

Mielőtt a (II.65) alapján kiszámítanánk az egyes deriváltak értékét a neutrális pontban, vezessünk be dimenziótlan mennyiségeket:

$$i_s = j_s / \varrho_0 v_{a0}; \quad x = u_0 / v_{a0}$$

ahol  $v_{a0} = (v_{10} + r_0 v_{20}) \cdot (1+r_0)^{-1}$ . Továbbá legyen

$D_{a0} = (D_1 + r_0 D_2) \cdot (1+r_0)^{-1}$  és  $S_2 \neq 0$ , ekkor (II.63) így írható:

$$i_s = \frac{\varrho_{10}}{\varrho_0}(1+r_0) + \frac{\varrho'_{10} D_{a0}(1+r_0)}{v_{a0} \varrho_0} \quad (\text{II.66a})$$

$$x = \frac{\varrho'_{10}}{S_2}(1+r_0) + \frac{\varrho_{10} D_2 \dot{r}_0 E''_0}{S_2 v_{a0}} + \frac{\varrho''_{10} D_{a0}(1+r_0)}{S_2 v_{a0}} \quad (\text{II.66b})$$

A  $\varrho_{10}^{(i)}$  ( $i=0, 1, 2$ ) függvényértékek hosszabb számolás után meghatározhatók. Legyen  $N \equiv L + (1+r)M$ , ekkor

$$\varrho_{10} N_0 = R_0 + T_0 M_0;$$

$$\varrho'_{10} N_0 = R'_0 + T'_0 M_0 - L'_0 \varrho_{10};$$

$$\varrho''_{10} N_0 = R''_0 + T''_0 M_0 + T_0 M''_0 - N''_0 \varrho_{10} - 2L'_0 \varrho'_{10}$$



Az egyes mennyiségek neutrális pontban felvett értékét a hely kímélése céljából nem írom fel. A [II.25]-ben minden tag értékét megadtam. A következő dimenziótlan paramétereket célszerű bevezetni. Először felírjuk a domén alakjára is érzékeny domén-alak-paramétereket:

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \tau_{i0} D_{a0} S_2 / S_0; & \alpha_2 &= v_{a0} \tau_{i0} S_3 / S_2; \\ \alpha_3 &= \alpha_d \alpha_2; & \alpha_4 &= \tau_{i0} D_{a0} S_4 / S_2; & \partial_0 &= \alpha_d \alpha_s; \\ \alpha_s &= v_{a0}^2 \tau_{i0} \tau_{Ma} E'_0 / E_0; & (\alpha_0 &= \alpha_{Ma} \partial_0),\end{aligned}\quad (\text{II.67a})$$

és az egyéb paraméterek:

$$\begin{aligned}\alpha_g &= \tau_{i0} / \tau_g; & \alpha_{Ma} &= \tau_{i0} / \tau_{Ma}; \\ \gamma_r &= E_0 / r_0 (dr/dE)_0; & \delta_i &= D_i / D_{a0}; & \delta &= \delta_1 - \delta_2 \\ \tau_{Ma} &= \frac{\varepsilon}{4\pi Q_0 \mu_{a0}}; & \mu_{a0} &= \frac{\mu_1 + r_0 \mu_2}{1 + r_0}; & r_{10} &= (1 + r_0)^{-1};\end{aligned}\quad (\text{II.67b})$$

ahol az elmélet lényeges karakterisztikus idejének  $\tau_{i0}$ -nak definíciója

$$\frac{1 + r_0}{\tau_{i0}} = \frac{1}{\tau_{1t}} + \frac{r_0}{\tau_{2t}} + \frac{1 + r_0}{\tau_g}, \quad (\text{II.68a})$$

míg a völgyekből való elektron-befogások különbözőségét az

$$\alpha_{21} = \tau_{i0} \left( \frac{1}{\tau_{2t}} - \frac{1}{\tau_{1t}} \right) \quad (\text{II.68a})$$

paraméterrel vesszük figyelembe.

Megjegyzem, hogy  $\tau_{1t} = \tau_{2t}$  esetén a (II.68a)-ban az  $(1 + r_0)$ -al egyszerűsíteni lehet és így  $\tau_{i0}$  független lesz az  $E_0$  csúcstértől!

Ezek után a  $Q_{10}/Q_0$  mennyiségeket írjuk fel. Legyen  $G_0 = x + \alpha_d$ , akkor

$$r_{10}^{-1} \cdot \frac{Q_{10}}{Q_0} = [x(i_s + \vartheta_0) + \alpha_d \alpha_g] \cdot G_0^{-1} \quad (\text{II.69a})$$

$$r_{10}^{-1} \frac{Q'_{10} D_{a0}}{Q_0 v_{a0}} = [x(x + \alpha_3) - \alpha_d \alpha_g] \frac{\vartheta_0}{G_0} + r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_0 \alpha_d \delta G_0^{-1} x \frac{Q_{10}}{Q_0} \quad (\text{II.69b})$$

A fentiek alapján a dimenziótlan  $i_s$ -re adódik:

$$i_s \bar{G}_0 = G_0 \{ \alpha_g + \alpha_s [x(1 + \alpha_3) + x^2 - \alpha_d \alpha_g] \} + r_0 \gamma_r \alpha_0 x \delta r_{10}^2 \cdot (\alpha_d \alpha_g + x \vartheta_0) \quad (\text{II.70a})$$

míg a  $Q_{10}/Q_0$  az alábbi formulával fejezhető ki:

$$r_{10}^{-1} \frac{Q_{10}}{Q_0} \bar{G}_0 = \alpha_0 G_0 + x \{ \vartheta_0 + \alpha_s [x(1 + \alpha_3) + x^2 - \alpha_d \alpha_g] \} \quad (\text{II.70b})$$

ahol

$$\bar{G}_0 = G_0 - r_0 \gamma_r \alpha_0 x^2 \delta r_{10}^2.$$

A domén-sebesség meghatározása lényegesen bonyolultabb, hiszen a (II.66b)-ben



a  $q_{10}''$  is szerepel. Helyettesítsük be a fentebb felírt  $q_{10}'$  értékét, akkor adódik

$$x = \alpha_2 x - \alpha_g + r_0 \gamma_r \alpha_M (x + \alpha_d \delta_2) q_{10}/q_0 + \tau_{r0} q_{10}'' r_{10} N_0/S_2 v_{a0},$$

ahol figyelembe vettük, hogy  $\delta(1+r_0)^{-1} + \delta_2 = 1$ . Ezután a  $q_{10}''$ -t kell meghatározni. Hosszas számolás után a  $q_{10}$  ismeretében ez elvégezhető, és (II.66b)-ből adódik:

$$\begin{aligned} xP = & -\alpha_g F + \alpha_2 x^2 + (3 - 2\delta_2) r_{10} r_0 \gamma_r \alpha_M x i_s - \alpha_M K x q_{10}/q_0 - \\ & - r_0 \gamma_r \alpha_d \alpha_M (1 + \alpha_{21} r_{10}) q_{10}/q_0 \end{aligned} \quad (\text{II.71})$$

ahol

$$P = 1 - \alpha_2 - \alpha_4 - r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_M \delta_2 \delta_0$$

$$F = 1 + \alpha_3 - r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_d \alpha_M$$

$$K = 1 + r_0 + r_0 \gamma_r (2\delta r_{10} + v_{20}/v_{a0} - \delta r_{10} \alpha_3).$$

Most a  $q_{10}/q_0$  tagot behelyettesíthetjük (II.69a) alapján és így a dimenziótlan  $x$  sebességre kapjuk:

$$b_3 x^3 + b_2 x^2 + b_1 x + b_0 = 0 \quad (\text{II.72})$$

$$b_3 = +\alpha_2$$

$$b_2 = +\alpha_d \alpha_2 - P + (3 - 2\delta_2) \cdot r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_M i_s - r_{10} \alpha_M K (i_s + \vartheta_0);$$

$$\begin{aligned} b_1 = & -\alpha_d P - \alpha_g F + (3 - 2\delta_2) \cdot r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_d \alpha_M i_s - \alpha_d \alpha_M \alpha_g r_{10} K - \\ & - r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_d \alpha_M \cdot (1 + \alpha_{21} r_{10}) \cdot (i_s + \vartheta_0); \end{aligned}$$

$$b_0 = -\alpha_d \alpha_g [F + r_0 r_{10} \gamma_r \alpha_d \alpha_M \cdot (1 + \alpha_{21} r_{10})].$$

A (II.70), (II.72) csatolt algebrai egyenletrendszer jelent a keresett  $u_0$  és  $j_s$  mennyiségekre, melyből az általános kétállapot modellben megvizsgálható a csapdák hatása a stacioner domén-mozgásra. Az egyenletrendszer numerikus vizsgálata helyett, a csapda-mentes esetekhez hasonlóan most is közelítő kifejezéseket adunk meg az  $i_s$  áramra és az  $u_0$  sebességre. A közelítés most is abban áll, hogy a  $j_s$  áram-kifejezésből elhagyjuk a diffúziós tagot. Ha ezt a (II.66a) dimenziótlan egyenletbe tesszük, azt kapjuk, hogy

$$i_s = (1 + r_0) \frac{q_{10}}{q_0}.$$

Ennek alapján (II.69a) segítségével viszont külön-külön is meghatározhatjuk az  $i_s$  és  $q_{10}/q_0$  mennyiségeket. Könnyű belátni, hogy a kellemetlen  $G_0$  kiesik és kapjuk:

$$i_s = \alpha_g + \alpha_s x \quad (\text{II.73})$$

$$(1 + r_0) \frac{q_{10}}{q_0} = \alpha_g + \alpha_s x. \quad (\text{II.74})$$

Látható, hogy a közelítés egyúttal az  $|x| \ll 1$  feltételt is jelenti. Ez feltétlen igaz, ha a csapdák valóban hatással vannak a domén-mozgásra azáltal, hogy lényegesen hozzájárulnak a tértöltéshez, illetve a csapdákon való befogás karakterisztikus ideje összemérhető a probléma más karakterisztikus idejével. A (II.73) közelítésről



érdeemes megjegyezni, hogy „véletlenül” még  $x = -\alpha_d$  esetében, tehát  $G_0 \rightarrow 0$  esetben is a pontos értéket adja. Ugyanez már nem mondható el a (II.74) közelítésről.

Két lehetőség van a dimenziótlan  $x$  sebesség meghatározására. Az egyik, hogy a (II.73) közelítést behelyettesítjük a (II.72)-ben szereplő  $b_2$  és  $b_1$  koefficiensekbe, a másik, hogy a (II.73) és (II.74) kifejezéseket közvetlen a (II.71)-be helyettesítjük. Ezt az utóbbi utat választva egyszerű számolás után, felhasználva a  $\delta r_{10} + \delta_2 = 1$  összefüggést, kapjuk:

$$C_0 x^2 - P_0 x - \alpha_g F_0 = 0$$

$$C_0 = \alpha_2 - \alpha_M \alpha_s r_{10} K_0;$$

$$P_0 = 1 - \alpha_2 - \alpha_4 + \gamma_r r_0 \alpha_d \alpha_M \alpha_s r_{10}^2 (\delta + \alpha_{21}) + \alpha_g \alpha_M r_{10} K_0;$$

$$F_0 = 1 + \alpha_3 + \gamma_r r_0 \alpha_d \alpha_M r_{10}^2 (\delta + \alpha_{21});$$

$$K_0 = 1 + r_0 - \gamma_r r_0 (1 - v_{20}/v_{a0}) - \gamma_r r_0 r_{10} \delta \alpha_3.$$

Egyszerű analízis mutatja, hogy az elhagyott gyök éppen a  $G_0 = 0$ -nak felel meg és így, mint korábban is, létezik a „diffúziós módus”, melynek sebessége

$$-u_0^{(II)} = \frac{D_{a0}}{v_{a0} \tau_{10}}.$$

A másik két gyököt azonnal felírhatjuk:  $-x^{(I)} \approx \alpha_g F_0 / P_0$ ,  $x^{(III)} \approx P_0 / C_0$ . Az első gyök drift-módusnak nevezhető, míg a második gyök által képviselt módustról nincs se elméleti, se kísérleti evidencia.

A drift-módus sebessége:

$$-u_0^{(I)} = v_{a0} \alpha_g \frac{1 + \alpha_3 + r_0 r_{10}^2 \alpha_d \alpha_M (\delta + \alpha_{21})}{1 - \alpha_2 - \alpha_4 + \gamma_r r_{10} \alpha_d \alpha_M \alpha_s (\delta + \alpha_{21}) + \alpha_g \alpha_M r_{10} K_0} \quad (II.75)$$

A fenti kifejezés levezetésénél nem korlátoztuk a számítást a Gunn-effektusra, így megállapíthatjuk: az általános kétállapot modellben a domén-sebesség akkor is függhet a domén alakjától, ha a NDV-t eredményező átmenetek pillanat-szerűen mennek végbe. Másszóval pl. a Gunn-domének, amelyek csapda mentes esetben domén-alaktól függetlenül haladnak, csapdák jelenlétében úgy viselkedhetnek, mint a rekombinációs domének. Ennek nyilvánvalóan az oka, hogy a töltésnek ismét van lokalizált, zérus-mozgékonyosságú komponense.

Másrészt, ha feltesszük, hogy a DAP-ek elhanyagolhatók, ez mint könnyű belátni, megfelel pl. annak az esetben, amikor a kvázi-egyensúly a csapdákkal is fennáll, vagy jó közelítéssel kvadratikusan alakul ki, akkor  $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 0$  és egyedül az  $\alpha_s$  szerepel, mint alak-függő tag.

Egyszerű becslés mutatja, hogy az  $\alpha_s$ -t tartalmazó tag is általában elhanyagolható, valamint az  $r_0$  és  $B$  szokásos értékével  $r_0 B > \gamma_r$  és így  $r_{10} K_0 \approx 1$ .

Az alaktól független domén-sebességre kapjuk:

$$-u_0^{(I)} = v_{a0} \alpha_g \frac{1 + \gamma_r r_0 r_{10}^2 \alpha_d \alpha_M (\delta + \alpha_{21})}{1 + \alpha_g \alpha_M} \quad (II.76)$$

A számítás kiinduló feltevése volt, hogy  $\mu_i$ ,  $D_i$  ( $i=1, 2$ ), állandók. Triviális általánosítása a fenti kifejezésnek, hogy  $v_{a0}$ -t azonosítjuk a tényleges drift-sebességgel, amely-



nek térfüggése ismert. Ennek alapján a domén-sebesség csúcstértől való függése minden további nélkül meghatározható.

Lényegesnek adódik három mennyiség:  $v_{a0}$ ,  $\alpha_g = \tau_{t0}/\tau_g$  és  $\alpha_M = \tau_{t0}/\tau_{Ma}$  térerősség függése. Most lehet látni, hogy a  $\tau_{1t}$  és  $\tau_{2t}$  időállandók azonos volta esetén (v.ö. (II.68a))  $\tau_{t0}$  független a csúcstértől és így ebben az esetben a  $v_{a0}$  térfüggésével kell számolni.

A  $\xi = \tau_{1t}/\tau_{2t}$  paramétertől függően jelentősen változhat a domén-sebesség értéke és csúcstér függése. Ez a felismerés, melyet [II.25] dolgozatban közöltem először, az újabb kísérleti vizsgálatok szerint megerősítést nyert. Erről részletesebben a III.4. pontban írok.

E pont befejezéséként a rekombinációs domének sebességét meghatározó kifejezést is felírom a csapdák jelenlétében, ami egyszerűen megtehető a (II.75), vagy (II.76) kifejezés alapján, ha a különböző mennyiségek definíciójánál figyelembe vesszük, hogy az alacsony mozgékonyaságú állapotokban valójában zérus a mozgékonyaság, valamint, hogy a II.1 ábrán szaggatott vonallal jelzett átmenetek elhanyagolhatók. Ez a két kikötés azt jelenti, hogy  $\mu_2 = D_2 = 0$ , ( $B = 0$ );  $\tau_{2t}, \tau_{t2} \rightarrow \infty$ .

#### A rekombinációs domének csapdák jelenlétében

Az általános két-állapot modell által nyújtott áram és sebesség kifejezéseket könnyen átírhatjuk a rekombinációs domének esetére. A szereplő mennyiségek közül  $\alpha_0, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_s, \alpha_d, \alpha_M, \vartheta_0$ , alakja változatlan marad, csak a  $\tau_{t0}, \tau_{Ma}, D_{a0}, v_{a0}$  helyébe kell beírni a  $\tau_0, \tau_{M0}, D_n, v_0$  mennyiségeket, ahol

$$\frac{1}{\tau_0} = \frac{1}{\tau_{1t}} + \frac{1+r_0}{\tau_{t1}}; \quad \tau_{M0} = \frac{\varepsilon}{4\pi\varrho_0\mu_n}.$$

Változtatni kell az  $\alpha_g$  mennyiséget, mivel  $\alpha_g \rightarrow (1+r_0) \frac{\tau_0}{\tau_{t1}}$  írandó. Teljesen azonos kifejezés adódik az  $1 + \alpha_{21}r_{10}$  mennyiségre. Pontosabban, most  $\delta_2 = 0$ ,  $\delta = 1 + r_0$ , ezért  $\delta + \alpha_{21} = \delta(1 + \alpha_{21}\delta^{-1}) = (1+r_0)(1 + \alpha_{21}r_{10}) = (1+r_0)^2 \frac{\tau_0}{\tau_{t1}} = (1+r_0)^2 \alpha_{tg}$ . Mivel  $\tau_{t1}$  a csapdákvaló generáció ideje, célszerű volt itt a  $\tau_0/\tau_{t1}$  helyébe az  $\alpha_{tg}$  jelölést bevezetni.

Végül a sebesség kifejezésben szereplő  $K_0$  is egyszerűsödik, mivel  $v_{20} = 0$ ,  $r_{10}\delta = 1$ ,  $K_0 \rightarrow 1 + r_0 - \gamma_r r_0 - \gamma_r r_0 \alpha_3 \equiv K_{0R}$ . Ezek után mind az áram, mind a sebesség meghatározható. Nem fog félreértést okozni, hogy most is  $\alpha_i$  mennyiségeket írok, hogy ne kelljen új jelöléseket bevezetni. Természetesen az alábbiakban szereplő  $\alpha_i$ -kban a fent bevezetett  $\tau_0, \tau_{M0}, \tau_{tg}$  szerepel:

$$j_s = \varrho_0 v_0 (\alpha_{tg} + \alpha_s u_0/v_0) \quad (\text{II.77})$$

$$-u_0^{(II)} = v_0 \alpha_{tg} \frac{1 + \alpha_3 + \gamma_r r_0 \alpha_d \alpha_M \alpha_{tg}}{1 - \alpha_2 - \alpha_4 + \gamma_r r_0 \alpha_d \alpha_M r_{10}^{-1} \alpha_s + \alpha_{tg} \alpha_M} \quad (\text{II.78})$$

Itt figyelembe vettem, hogy a  $K_{0R}$ -ból csak az  $1 + r_0$ -es tagot kell megtartani, lévén a másik  $\gamma_r$ -t tartalmazó tag a nevezőben lényegesen nagyobb, mint a  $K_{0R}$ -ból származó és  $\gamma_r$ -t tartalmazó tag.



A (II.78) igen lényeges következtetésekre ad alkalmat. Mint korábban említettem, a kísérletileg megfigyelt igen alacsony domén-sebességet igyekeztek bizonyos ismeretlen csapdák jelenlétével magyarázni. A fenti sebesség- és áram-kifejezés alapján valóban megállapítható, hogy a csapdák lecsökkentik a domén-sebességet, de ha feltesszük, hogy a csapdákon való befogás is leírható a kvázi-egyensúly közelítésben, azaz a (II.78) nevezőjében minden tagot elhanyagoltunk az 1 mellett, akkor jó közelítéssel ismét az  $|u_0| = k j_s$  összefüggést kapjuk, ahol a  $k$  arányossági tényező továbbra sem érzékeny a mintára kapcsolt feszültségre. Másszóval, a sebesség és áram most is azonos módon az  $\alpha_{tg} v_0$  szorzattól függ. Ettől eltérést csak akkor kapunk, ha legalább a csapdákra nézve eltekintünk a lokális-egyensúly feltételezéstől. Ez viszont felveti a kérdést, mi szükség van ismeretlen centrumok feltételezésére, ha azok segítségével sem lehet az  $u_0$  és  $j_s$  különböző viselkedését leírni, ha ugyanabban a közelítésben (lokális-egyensúly) számolunk, mint csapdák nélkül.

Ugyanakkor természetesnek látszik a gondolat: az  $u_0$  és  $j_s$  különböző viselkedésének magyarázata csapdák feltételezése nélkül is lehetséges, ha eltekintünk a kvázi-egyensúly közelítéstől. Mint látni fogjuk, ez a gondolat vezet pl. az arannyal kompenzált Ge-ban a domén-sebesség helyes nagyságrendjének és az  $u_0$  és  $j_s$  különböző viselkedésének magyarázatához.

#### II. 4. A rekombinációs- és Gunn-domének közötti analógia korlátjáról

A rekombinációs domének és a Gunn-domének analógiája adott lehetőséget a két effektus szimultán tárgyalására. A két állapotmodell lényeges pontja az volt, hogy a rekombináció kinetikáját leíró  $S-R-H$  modell egyenletét linearizáltuk a koncentrációra nézve és így pl. az (II.5) egyenletnél a  $\Psi \approx \Psi_1$  közelítéssel éltünk. Ezt a közelítést Ridley alapvető munkája óta [II.1] használták, hiszen a térerősségbeli nem-linearitás — amelyet a  $\tau_r(E)$  függvény képvisel — valóban a probléma jellegzetessége. Valójában nem is elemezték ennek a közelítésnek alkalmazhatóságát, megelégedtek azzal, hogy  $n_0 \ll n_{t0}$ ,  $p_{t0}$  feltétel teljesüljön és nem vizsgálták a  $p_{t0}$ ,  $n_{t0}$  egymáshoz való viszonyának kérdését, pedig a kísérleteknél gyakran előfordult, hogy a  $K_t \equiv n_{t0}/p_{t0}$  hányados jelentősen változott (pl.  $10^{-2} - 10^2$  értékek között). A Gunn-effektusnál az alacsony-mozgékonyaságú állapotok száma mintáról-mintára változatlan és megegyezik az  $\langle 100 \rangle$  irányban levő ekvivalens völgyek állapotsűrűségével.

Az analógia a két effektus között azért nem teljes, mert a  $\Psi$  linearizálása nem mindig korrekt, míg a  $\Psi_{12}$ -ben mindig\* használhatjuk az (I.9) alakot.

A fentiek alapján, a jelen pont célkitűzése a  $\Psi$  linearizálásának következményeit megvizsgálni. Ezt elsőnek a [II.26] dolgozatomban vizsgáltam a DAP-módszer keretén belül.

A tárgyalásnál némileg módosítom a jelöléseket azért, hogy *H. K. Sacks* és *A. G. Milnes* számítógépes vizsgálataival az eredményeket könnyebben össze tudjam hasonlítani.

\* Ha a GaAs elfajult lenne, akkor a központi (nagymozgékonyaságú) völgyben az üres és betöltött állapotok összemérhetők lennének. Ekkor azonban — elérhető áramok mellett — nem lehet úgy felmelegíteni az elektron-gázt, hogy azok kellő számban átmenjenek az  $\langle 100 \rangle$  völgyekbe.



Már a II.1. pontban utaltam arra, hogy az  $n_t$ ,  $p_t$  jelölés valójában nem korlátozza a tárgyalást a semleges és egyszerűen negatívan töltött centrumok vizsgálatára. Ez azért sem lenne szerencsés, mert pl. az aranynál a két töltésállapot az  $\text{Au}^=$  és  $\text{Au}^=$ , míg más centrumoknál pl. a GaAs-be bevitt réz esetén  $\text{Cu}^-$   $\text{Cu}^=$  állapotokról van szó. Mint azonnal látni fogjuk, erre az esetre is könnyű felírni a vonatkozó egyenleteket. Sőt, ha feltesszük, hogy  $n_{t,s}$  és  $n_{t,s+1}$  töltésállapot lép csak fel, akkor a Poisson-egyenletbe a tértöltés így alakul:

$$\varrho = q[N_d - n - sn_{t,s} - (s+1)n_{t,s+1}]$$

azonban  $n_{t,s} + n_{t,s+1} = N_t$  és így írhatjuk:

$$\varrho = q(N_d - sN_t - n - n_{t,s+1}).$$

További egyszerűsítés, ha figyelembe vesszük, hogy egyensúlyban  $\varrho \equiv 0$ , azaz

$$N_d - sN_t - n_0 - n_{t,s+1,0} = 0$$

ahol a zérus index most az egyensúlyt jelenti. Ezt az összefüggést felhasználva  $N_d - sN_t = n_0 + n_{t,s+1,0}$  azaz

$$\varrho = \varrho_0 - \varrho_n - \varrho_{s+1}, \quad \text{ahol} \quad \varrho_0 = q(n_0 + n_{t,s+1,0}).$$

A kísérleteknél gyakran használatos jelöléssel, pl.  $s=1$ ,  $s=2$  esetében  $\varrho_0 = q(N_{t0} + n_0)$  és a változó  $\varrho_2 = qN_t^-$ . Arany-típusú szennyezés esetén csak annyiban változik a helyzet, hogy  $\varrho_0 = (N_{t0} + n_0)q$  és a változó  $\varrho_2 = qN_t^=$ . A fentiek alapján látható, hogy az előző pontokban használt modell korrekt, csak a  $\varrho_0$  kompenzáló töltést kell megfelelően megválasztani.

Az  $N_t^=$  és  $N_t^-$  mennyiségeket explicite meghagyjuk az egyenletekben, ezért bevezetjük a következő jelölést (lásd az (I.5) képlet jelöléseit):

$$N_t C_{n,2}^1 f_{n,2}^1(E) \equiv N_t C_{n,2}^1(E) = \frac{1}{\tau_r(E)}; \quad C_{n,2}^1 n_1 = \frac{1}{\tau_g}$$

azaz a (II.5)-tel szemben nem a  $p_{t0}$  szerepel a  $\tau_r$  definíciójában, hanem a betöltéstől független  $N_t = N_t^- + N_t^=$  teljes koncentráció.

A következő feltevéseket használjuk:

a) A vezetési sávban a  $v_d(E) = \mu(E) E$  driftsebesség a térerősség ismert függvénye.

b) A diffúziós együttható tértől független.

c) A  $C_{n,2}^1(E)$  és így  $\tau_r$  ismert függvénye a térerősségnek. Ezek alapján a (II.1)–(II.4) egyenletek átírhatók ( $\varrho_t \equiv qN_t$  jelöléssel), majd a Riemann-megoldást keresve a következő egyenletrendszer adódik:

$$\begin{aligned} j_n' &= u_0 \varrho' \\ j_n &= u_0 \varrho + j_s = \frac{\varepsilon E'}{4\pi} u_0 + j_s = \varrho_n v_d(E) + D_n \varrho_n' \\ -u_0 \varrho_2' &= \frac{1}{\tau_r(E)} \varrho_n \left( 1 - \frac{\varrho_2}{\varrho_t} \right) - \frac{1}{\tau_g} \cdot \varrho_2 \\ E' &= \frac{4\pi}{\varepsilon} (\varrho_0 - \varrho_n - \varrho_2) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} \varrho \end{aligned}$$



Világosan látható, hogy a rekombináció kinetikáját leíró egyenletek linearizálása abban áll, hogy  $1 - \varrho_2/\varrho_t$  helyébe  $(\varrho_t - \varrho_2)/\varrho_t \approx N_{t0}^-/N_t$  értéket írunk.

A II.2. pontban alkalmazott eljárást most is lehet alkalmazni:  $\varrho_n$  és  $\varrho_2$  kifejezhető az  $E$  térerősségnek és deriváltjainak függvényeként, csak most pl.  $\varrho_n$ -re másodfokú egyenlet adódik. Ennek közelítő pozitív gyöke a következő alakú lesz:

$$\varrho_n = \tau \frac{u_0 \left( j_s + u_0 \frac{\varepsilon E'}{4\pi} + D_n \frac{\varepsilon E'}{4\pi} \right) + \left( \varrho_0 - \frac{\varepsilon E'}{4\pi} \right) \frac{D_n}{\tau_g}}{u_0 v_d \tau + D_n \left( 1 + \tau_{M0} v_{d0} K_t \frac{E'}{E_0} \right)} \equiv \tau \frac{V}{N} \quad (\text{II.79})$$

ahol

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_r} \left( 1 - \frac{\varrho_0}{\varrho_t} \right) + \frac{1}{\tau_g}$$

$$\frac{\tau \varrho_0}{\tau_r \varrho_t} \approx \frac{\varrho_0}{\varrho_t - \varrho_0} = \frac{N_{t0}^- + n_0}{N_{t0}^- - n_0} \approx K_t \equiv \frac{N_{t0}^-}{N_{t0}^-}$$

A jelölések:  $v_{d0} = \mu_0 E_0$ ,  $\tau_{M0} = \varepsilon/4\pi \varrho_0 \mu_0$  és mindkettő függ a csúcstér értékétől,  $E_0$ -tól.

Ha a  $\varrho_n$ -re kapott fenti kifejezést összehasonlítjuk a (II.26) megfelelő kifejezésével látható, hogy a nevezőben a  $D_n$  melletti szorzó tartalmazza a  $K_t$  paramétert, és jóllehet ez a tag a neutrális pontban éppen zérus, a  $\varrho_n$  deriváltjainak a neutrális pontban felvett értékei már függenek  $K_t$ -től, és mivel a  $j_s$  és  $u_0$  kiszámításánál  $\varrho_{n0}$ ,  $\varrho_{n0}''$  is fellép, várható, hogy  $K_t$  is szerepelni fog ezen mennyiségekben. Fontos megjegyezni, hogy  $K_t$  kvázi-egyensúly esetén sem hanyagolható el. A megfelelő kifejezést a [II.26] dolgozatomban megadtam.

Most már felírhatjuk az  $E(z)$ -re vonatkozó differenciálegyenletet. Először a (II.79) alapján  $\varrho_n$ -t kiszámítjuk, majd ezt az áram kifejezésbe helyettesítjük. Némi átalakítás után kapjuk:

$$N(F + \tau V' + V \tau') = V \tau N' \quad (\text{II.81})$$

$$F = v_d \tau \left[ u_0 \frac{\varepsilon E''}{4\pi} + \frac{\varrho_0}{\tau_g} \left( 1 - \frac{\varepsilon E'}{4\pi \varrho_0} \right) \right] - \left( j_s + u_0 \frac{\varepsilon E'}{4\pi} \right) \left( 1 + \frac{\varepsilon E'}{4\pi \varrho_0} K_t \right).$$

Kvázi-egyensúly esetén lényegesen egyszerűbb kifejezés adódik [II.26].

*A  $j_s$  és  $u_0$  meghatározása*

Könnyű belátni, hogy a korábban alkalmazott eljárás, amikor pl. a (II.29) és (II.30) egyenletekből indultunk ki ekvivalens azzal, ha a vonatkozó differenciálegyenletet megkíséröljük kielégíteni egy feltételezett  $E(z)$  függvénnyel, amelyet pl.

$$E(z) = E_0 \left( 1 - a \frac{z^2}{2!} + b \frac{z^3}{3!} + c \frac{z^4}{4!} + \dots \right) \quad (\text{II.82})$$

alakban írunk fel a neutrális pont körül. Az  $E_0$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... paramétereket vagy a kísérletből vagy a numerikus számítás eredményeiből kell venni. Nem megfelelő,



hogy ahhoz, hogy a (II.81) egyenletet  $z$ -ben *első rendben* kielégítsük, a (II.82) térerősséget  $z$  *negyedik hatványáig* ismerni kell.

Mivel  $v_d, \tau$  függenek az  $E$  tértől, ezért a  $z$ -szerinti derivált kiszámításához használhatjuk a következő összefüggést. Legyen  $f[E(z)]$   $E$ -nek differenciálható függvénye, akkor a következőt írhatjuk:

$$f[E(z)] = f_0 \left[ 1 - \gamma_f \left( -a \frac{z^2}{2!} + b \frac{z^3}{3!} + \dots \right) + \dots \right] \quad (\text{II.83})$$

$$\gamma_f = -\frac{E_0}{f_0} \left( \frac{df}{dE} \right)_0$$

és a „0” index a csúcstérre vonatkozik.

Ennek segítségével könnyen felírhatjuk a  $z$ -szerinti deriváltak értékét a neutrális pontban.

Figyelembe véve az  $F, N, V$  mennyiségek definícióját, a következő tagokat kellett kiszámítani ahhoz, hogy a (II. 81) differenciálegyenletet  $z$ -ben elsőrendig kielégítsük:

$$N_0(F_0 + \tau_0 V_1) = \tau_0 V_0 N_1 \quad (\text{II.84a})$$

$$N_0[F_1 + \tau_0(V_2 + \gamma_\tau a V_0)] + N_1 F_0 = \tau_0 V_0 N_2 \quad (\text{II.84b})$$

és itt

$$N_0 = D_n + u_0 v_{d0} \tau_0; \quad N_1 = -D_n \tau_{M0} v_{d0} a K_t;$$

$$N_2 = u_0 v_{d0} \tau_0 \gamma_{vt} + D_n v_{d0} \tau_{M0} K_t b;$$

$$V_0 = u_0 j_s + \frac{D_n \varrho_0}{\tau_g} - u_0 D_n \frac{\varepsilon E_0}{4\pi} a;$$

$$V_1 = \frac{\varepsilon E_0}{4\pi} \left( u_0 D_n b + \frac{D_n a}{\tau_g} - u_0^2 a \right);$$

$$V_2 = \frac{\varepsilon E_0}{4\pi} \left( u_0 D_n c - \frac{b D_n}{\tau_g} + u_0^2 b \right);$$

$$F_0 = v_{d0} \tau_0 \left( \frac{\varrho_0}{\tau_g} - \frac{u_0 \varepsilon E_0}{4\pi} a \right) - j_s;$$

$$F_1 = v_{d0} \tau_0 \left( \frac{a}{\tau_g} + u_0 b \right) \frac{\varepsilon E_0}{4\pi} + \left( u_0 + j_s \frac{K_t}{\varrho_0} \right) \frac{\varepsilon E_0 a}{4\pi}.$$

Itt ismét az  $u_0$ -ra adódó algebrai egyenlet legkisebb gyökét vesszük. Megjegyezzük, hogy a gyakorlatban szokásos paraméter-értékek mellett feltehetjük, hogy  $|u_0|/v_{d0} \ll 1$ ,  $\alpha_d \equiv D_n/v_{d0}^2 \tau_0 \ll 1$ , de  $\alpha_d \gg |u_0|/v_{d0}$ . Ennek értelmében  $N_0 \approx D_n$ ,  $V_0 \approx D_n \varrho_0/\tau_g$  és így (II.84a)-ban, mely az áramra ad összefüggést, a diffúziós tagok elhagyhatók. Más szóval az áramot az  $F_0 \approx 0$  összefüggésből határozhatjuk meg:

$$j_s = \varrho_0 v_{d0} \left( \frac{\tau_0}{\tau_g} - u_0 v_{d0} \tau_0 \tau_{M0} a \right) \quad (\text{II.85a})$$

és az elhagyott tagok nagyságrendje  $D_n \tau_{M0} a (K_t + 1) \cdot \tau_0/\tau_g$ . Ez az áramkifejezés meg-



egyezik a korábban kapott pl. (II.35) kifejezéssel, mivel a  $K_t$  paraméter csak az elhagyható tagokban lép fel.

Más a helyzet a domén-sebességgel! Helyettesítsük be a (II. 85a) áramkifejezést a (II.84b) összefüggésbe (ez azt jelenti, hogy  $N_1 F_0 \approx 0$  írható), akkor a domén-sebességre megkapjuk a keresett kifejezést. Valóban, felhasználva azt a tényt, hogy a szokásos paraméter-értékek mellett

$$|D_n b / v_{d0} a| \ll 1; \quad \beta_0 \alpha_d \ll 1$$

$$\beta_0 = K_t v_{d0}^2 \tau_0 \tau_{M0} a,$$

a drift-módusra adódik:

$$-u_0 = \frac{v_{d0}(K_t + 1) \frac{\tau_0}{\tau_g} \cdot \left(1 + \frac{\gamma_\tau D_n}{\tau_{M0} v_{d0}^2 (K_t + 1)}\right)}{1 + v_{d0} \tau_0 \frac{b}{a} + \tau_0 D_n \frac{c}{a} - K_t v_{d0}^2 \tau_0 \tau_{M0} a - \frac{\gamma_{v\tau} \tau_0^2}{\tau_g \tau_{M0}}} \quad (\text{II.85b})$$

Ezzel felírtuk általános esetre az áram és a domén-sebesség kifejezését. Az utóbbit összehasonlítva pl. a (II.39) kifejezéssel láthatjuk, hogy a  $K_t$  explicite fellép a sebességkifejezésben.

Az összehasonlítás azt is mutatja, hogy a domén-alak-paraméterek most is fellépnek, csak a (II.83)-nak megfelelően, most a deriváltakat az  $a, b, c$  paraméterekre vezettük vissza. Most sem ismerjük  $a, b$ , és  $c$  értékét, és így előre nem állapítható meg az egyes tagok járuléka.

Mielőtt a kvázi-egyensúly esetét tárgyalnánk, néhány megjegyzést szükséges tenni az e pontban használt eljárásról. Az a tény, hogy a differenciálegyenletet  $z$ -ben csak első rendig elégítjük ki, joggal felveti a kérdést, nem lehetséges-e tovább menni a közelítésben és így újabb összefüggéseket kapni az  $E_0, a, b, c, \dots$  paraméterekre. Ezt a meglehetősen hosszadalmas számítást elvégeztem a következő tagig a [II.26] dolgozatomban azonban nyilvánvaló, hogy most már a  $z^5$ -es tag együtthatója is fellép, és nem ismeretes olyan megfontolás, amely alapján a sorfejtést levágva, ne lépne fel újabb paraméter. Ez az oka annak, hogy a tényleges számolásnál, ha nem teszünk fel egy konkrét függvény-alakot, végül is végtelen sok csatolt egyenletet kell megoldani. Ennek kezelése természetesen éppen olyan nehéz, mint az eredeti egyenleté. A lényeges pont az, hogy az  $|u_0/v_{d0}| \ll 1$  közelítésben  $j_s$ -ben csupán egyetlen és az  $u_0$  kifejezésében is csak kevés számú domén-alak-paraméter lép fel. Arra a kérdésre, hogy ezek milyen járulékot adnak a korrekt  $j_s$  és  $u_0$  meghatározásánál, a III.1. pontban adunk választ, ahol az egyes paramétereket meghatározzuk Sacks és Milnes által vizsgált esetre.

### Kvázi-egyensúly feltételezése

Igen tanulságos felírni kvázi-egyensúlyban az áram és domén-sebesség kifejezéseit. Ismételten feltéve, hogy  $\alpha_d \beta_0 \ll 1$  és mint mindig  $|Db/v_{d0} a| \ll 1$ , kapjuk:

$$j_s = v_{d0} Q_0 \frac{\tau_0}{\tau_g} \quad (\text{II.86a})$$

$$-u_0 = v_{d0} \frac{\tau_0}{\tau_g} (K_t + 1) \left[ 1 + \frac{D_n}{\tau_{M0} v_{d0}^2 (K_t + 1)} \right]. \quad (\text{II.86b})$$



A következő fejezetben látni fogjuk, hogy a (II.86b) négyszögletes zárójelében fellépő tag elhanyagolható az egység mellett és így kvázi-egyensúly esetén a következő nevezetes összefüggéshez jutunk:

$$-u_0 = j_s(K_t + 1)/\varrho_0 \approx j_s \frac{N_t}{N_{t0}^- N_{t0}^+ q} = \frac{j_s}{q} \left( \frac{1}{N_{t0}^-} + \frac{1}{N_{t0}^+} \right) \quad (\text{II.87})$$

mivel  $\varrho_0 = q(N_{t0}^- + n_0) \approx qN_{t0}^-$ .

Ez a kifejezés mutatja, hogy ha vizsgáljuk pl. az  $u_0/j_s$  hőmérséklet-függését, akkor azt általában az  $1/N_{t0}^- + 1/N_{t0}^+$  kifejezés szabja meg és nem az  $N_{t0}^-$ , ahogy eddig feltételezték. A (II.87) levezetésénél feltételeztük, hogy kvázi-egyensúly van, tehát a domén-alak-paraméterek esetleges hőmérséklet-függése beleszólhat a kísérleti eredmények interpretálásába. Az is látható, hogy a (II.24)-ben felírt empirikus kifejezésben szereplő  $k$  arányossági tényezőre pontosabb értéket kapunk,  $K_t > 1$  esetre, de a kvázi-egyensúly feltételezése ismét kizárja annak lehetőségét, hogy a  $k$  feszültség-függő legyen. Ezt csak a (II.85) egyenletek alapján várhatjuk, mely tartalmazza a domén-alak-paramétereket is.

### III. A DAP-MÓDSZER EREDMÉNYEINEK ÖSSZEHASONLÍTÁSA SZÁMÍTÓGÉPES VIZSGÁLATOKKAL ÉS KÍSÉRLETI EREDMÉNYEKSEL

A DAP-módszer segítségével levezetett kifejezések alapján meg lehet határozni a domének sebességét és az áramot, ha ismerjük a probléma karakterisztikus mennyiségeit a csúcstérnek megfelelő térerősségnél és a domén alakját a neutrális pontban, a negyedik deriváltig bezárólag.

Láttuk azt is, hogy a domén-alak-paraméterek csak akkor lépnek fel explicite, ha a lokális egyensúly feltételezésétől eltekintünk. Mivel a jelen elmélet — természeténél fogva — nem adja meg a domén-alak-paraméterek konkrét értékét, három lehetőség van az elmélet igazolására.

Az egyik, hogy a számítógépes módszerekkel a nem-lineáris differenciálegyenlet-rendszert megoldjuk és a kapott numerikus eredményeket összevetjük a megfelelő kifejezések alapján számított értékekkel, a másik út, hogy a kísérleti adatok elemzésével vizsgáljuk a DAP-módszer érvényességét, végül a különböző elméleti számítások eredményeit hasonlítjuk össze. Ezt az utóbbi utat lényegében érintettem, amikor megállapítottam, hogy az összes eddigi elméleti számítások áram és sebesség kifejezése speciális esetként levezethető az általam kapott kifejezésekből, illetve rámutattam arra, hogy ilyen feltételek mellett igazak az említett kifejezések. Most, a teljesség kedvéért, a legfontosabb eseteket összefoglalom:

- a) A lineáris elmélet áram és sebesség kifejezései akkor *egyeznek meg formailag* a DAP-módszer eredményeivel, ha a doménről feltételezzük, hogy szimmetrikus, illetve más esetben, ha a kvázi-egyensúly feltétele érvényes. A lineáris elmélet azonban nem fogadható el a nagy-térerősségű domének leírására.
- b) Bonch-Bruevich kvázi-lineáris elmélete [II.11], Gauss-függvénnyel leírható domén-alakhoz vezet. Egységnyi nagyságrendű faktortól eltekintve, *formailag azonos* sebesség kifejezést ad az általam levezetett (II. 40') formula, de csak speciális feltételek mellett. A kvázi-lineáris elmélet jobb leírást ad, de az  $(E_0 - E_s)/E_s$  érték nem tekinthető kis paraméternek. Itt  $E_s$  a doménen kívüli tér értéke.



- c) A DAP-módszerből domén-alaktól függő sebesség és áram adódik és a koncentráció nem-linearitás is könnyen beépíthető az elméletbe ( $K_t = N_{t0}^-/N_{t0}^- > 1$  eset).

*Kvázi-egyensúly* esetén a [II.13]-ban tőlem függetlenül is rámutattak  $u_0$   $K_t$  függésére, azonban az általam kidolgozott általánosabb esetet, azaz a *kvázi-egyensúly nélküli* esetet korábban, 1971 júniusában mutattam be Vilniusban. A  $j_s$  alak-függésére az alábbiakban fogok kitérni.

E fejezet négy pontjában a numerikus számítások és a kísérleti vizsgálatok eredményeit vizsgálom a DAP-módszer tükrében.

### III. 1. Összehasonlítás Sacks és Milnes számítógépes vizsgálataival: rézzel kompenzált GaAs

Az előző fejezet 4. pontjában általánosítottam a rekombinációs doménekre vonatkozó tárgyalást arra az esetre, amikor  $K_t = N_{t0}^-/N_{t0}^-$  tetszőleges értékkel rendelkezik. Ez a körülmény, valamint, hogy a  $v_d(E)$  driftsebesség is tetszőleges függvény lehet, lehetőséget ad arra, hogy pontosabban elemezzem a domén-mozgást rézzel kompenzált felszigetelő GaAs-ban, *Sacks* és *Milnes* [III.1, 2] által végzett számítógépes vizsgálatai alapján. Lényeges, hogy  $v_d(E)$  megegyezik a GaAs vezetési sávjában az ismert driftsebességgel, melyet a következő kifejezéssel közelítettek:

$$v_d(E) = \mu_1 E [1 + B(E/E_1)^{K_0}] \cdot [1 + (E/E_1)^{K_0}]^{-1} \quad (\text{III.1})$$

ahol  $\mu_1 = 5 \cdot 10 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$ ;  $E_1 = 2,454 \cdot 10^3 \text{ V/cm}$ ;  $K_0 = 1,676$ ;  
 $B = 9,137 \cdot 10^{-3}$ . Néhány egyéb adat:  $n_0 = 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ;  
 $D_n = 130 \text{ cm}^2/\text{sec}$ ;  $\varepsilon = 12,5$ .

A rekombinációs centrumok paramétereit — beleértve a befogás térfüggését — a következő módon vették figyelembe:

$$N_t = 10^{17} \text{ cm}^{-3}; \quad N_{t0}^- = 8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}; \quad K_t = 1,25 \cdot 10^2; \quad \tau_g = 5,747 \cdot 10^2 \text{ sec}.$$

Elhagyva a  $C_{n,2}(E)$ -ben a most már szükségtelen indexeket, a befogási paramétert a következő alakban vették fel:

$$C_2(E) = C_{20} \left[ 1 + 10 \left( \frac{E}{2100} \right)^4 \right] \cdot \left[ 1 + \left( \frac{E}{2100} \right)^4 \right]^{-1} \quad (\text{III.2})$$

ahol  $C_{20} = 4,35 \cdot 10^3 \text{ cm}^3 \text{ sec}^{-1}$ .

A hosszadalmas számítógépes vizsgálat lehetőséget adott a fenti paraméterek mellett a vonatkozó nem-lineáris differenciálegyenlet rendszer megoldására: megállapították azt a  $j_s$  és  $u_0$  értéket, amelynél (adott feszültség mellett) domén alakul ki. Egyetlen esetben felrajzolták ([III.1] 7. ábra) a térerősségeloszlást is, azaz az  $E(z)$  függvényt. Ennek alapján megállapítható az  $E_0$  értéke és a domén alakja. Az  $E_0 = 8,2 \cdot 10^3 \text{ V/cm}$  csúcstérnél kiszámíthatjuk a (II.85a), (II.85b) formulákban szereplő mennyiségek értékét. Egyszerű számítás adja a domén-alaktól független paraméterekre:

$$v_{d0} = 5,124 \cdot 10^6 \text{ cmsec}^{-1}; \quad \tau_0 = 2,885 \cdot 10^{-7} \text{ sec}^{-1};$$

$$\tau_{M0} = 1,123 \cdot 10^{-13} \text{ sec}.$$

$$\gamma_\tau = 1,51 \cdot 10^{-2}; \quad \gamma_\mu = 1,371; \quad \gamma_{v\tau} = 0,386$$



Itt figyelembe vettem, hogy  $v_d = \mu E$ , és így nyilván

$$\gamma_{v\tau} = \gamma_\tau + \gamma_\mu - 1.$$

Most két lehetőségünk van. Először a kvázi-egyensúly feltételezésével számítjuk ki a  $j_s$  áramot és  $u_0$  sebességet a (II.86) formulák alapján, majd a domén-alak-paraméterek kiszámítása után a (II.85) alapján és összehasonlítjuk *Sacks* és *Milnes* által adott értékekkel. A (II.86) formulák alapján számolva, természetesen nincs szükség a domén alakjára, hiszen a kvázi-egyensúly feltételezése éppen a domén-alak-paraméterek elhanyagolásához vezet.

Egyszerű behelyettesítés mutatja, hogy a következő értékek adódnak:  $j_s = 41,15 \mu\text{A} \cdot \text{cm}^{-2}$ ;  $-u_0 = 0,324 \text{ cmsec}^{-1}$ .

Ugyanakkor a számítógépes integrálás eredménye  $59,4 \mu\text{A cm}^{-2}$  és  $0,575 \text{ cmsec}^{-1}$  értékeket eredményez (az értékeket a III.1. Táblázatban is összefoglaltam). Ami különösen meglepő és eddig más szerzők nem mutattak rá, hogy a kvázi-egyensúly feltételezés az áramra sem ad kielégítő pontos eredményt.

Az eltérés mintegy 30%. A domén-sebességre relatíve pontos érték adódik az eltérés kisebb, mint 50%. Vizsgáljuk most a domén-alak-paramétereket is tartalmazó (II.85) egyenletek alapján a  $j_s$  és  $u_0$  értékét. Az említett grafikonon ábrázolt  $E(z)$  térerősséget a (II.82)-nek megfelelő függvénnyel kell leírni, hogy az  $a, b, c$  paramétereket számszerűen ismerjük. Ez a számítás — a legkisebb négyzetes eltérést használva\* — a következő értéket adja:  $a = 2,472 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2}$ ;  $c/a = 2,828 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2}$ ;  $b = -5 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-3}$ ; Ezeket az értékeket behelyettesítve azt találjuk, hogy az *összes domén-alak-paraméter* tartalmazó tag azonos nagyságrendű járulékot ad ( $\beta_0 = 0,263$ ;  $\tau_0 D_n c/a = 0,106$ ;  $\tau_0 v_{d0} b/a = 0,299$ ). Ezek figyelembevételével  $j_s = 61,20 \mu\text{A cm}^{-2}$ ,  $-u_0 = 0,596 \text{ cm} \cdot \text{sec}^{-1}$  értékek adódnak. Ugyanakkor a  $\gamma_{v\tau} \tau_0^2 / \tau_9 \tau_{M0}$  értéke elhanyagolható az 1 mellett.

III. 1. TÁBLÁZAT

Mennyiség	Sacks és Milnes eredményei	DAP-módszer	
		kvázi egyensúly	általános eset
$j_s$ $\mu\text{A} \cdot \text{cm}^{-2}$	59,4	41,5	61,2
$-u_0$ $\text{cmsec}^{-1}$	0,575	0,324	0,596

Érdekes megjegyezni, hogy a vizsgált konkrét esetben a feszültség növelésével olyan helyzet alakul ki, amikor a domén-alakja lényegesen nem változik és *Sacks* és *Milnes* által megadott áramok és sebességek jól leírhatókká válnak a kvázi-egyensúly alapján számolt kifejezésekkel, azaz mivel  $K_i \gg 1$ , a  $-u_0 = j_s / qN_{i0}$  kifejezés használható.

Minden esetre az megállapítható, hogy a domén-mozgás nem tekinthető olyan egyszerű folyamatnak, mint korábban gondolták, hiszen a domén alakjának szerepe lényegesen bonyolítja ezt a képet még akkor is, ha a fenti esetben az áramban

\* Köszönetet mondok volt munkatársamnak, *Beleznay Ferencnek*, a fizikai tud. kandidátusának, aki ezt a számolást részemre elvégezte.



és sebességben is csak 30–40%-os változást eredményeznek. Az a körülmény, hogy a  $\tau_0^2/\tau_{M0}\tau_g \ll 1$  feltétel sem ad lehetőséget annak a kijelentésére, hogy a kvázi-egyensúly feltételezése korrekt, megerősíti elképzelésünket a domén-alak-paraméterek fontosságáról.

Azt a kérdést, hogy milyen feltételek mellett lesz a domén alakja aszimmetrikus, s hogy ez a befogás térfüggésére vonatkozó konkrét feltevésektől hogyan függ, megjósolni nem lehet. A [III.1]-ben tett feltevésekkel szemben egyetlen ellenvetés tehető: a kísérleti és elméleti [III.3]–[III.5] vizsgálatok azt mutatják, hogy a negatívan töltött — tehát az elektronokra nézve taszító — Coulomb-barrieren való befogás exponenciális térfüggéshez vezet. A (III.2) formula ezzel szemben igen „sima” függvény, amely növekvő térrel csak mintegy 10-es faktort változik és itt telítődik.

Fizikailag várható, hogy a térerősséggel drasztikusabban változó elektronbefogás esetén, valamint akkor, ha  $n_0$ ,  $N_{i0}$ ,  $N_{i0}^-$  egymáshoz viszonyított aránya változik, a domén alakja is különbözni fog a [III.1]-ben kapott közel szimmetrikus alaktól.

Az elmondottak alapján két kérdés megvilágítására van lehetőség. Az egyik, hogy miért azonosítható a domén-sebességre vonatkozó algebrai egyenlet legkisebb gyöke a tényleges domén-sebességgel. A másik, hogy milyen szemléletes képet lehet a domén-mozgáshoz hozzárendelni.

A véges számú módus közül fizikai megfontolás alapján kell választani. A DAP-módszer lényegéből következik, hogy pl. a határfeltételek segítségével ez nem végezhető el, hiszen a vonatkozó nem-lineáris differenciálegyenlet általános megoldása nem ismert. Figyelembe véve azonban, hogy a domén-alak-paraméterek folytonos csökkentésével a legkisebb gyök megy át a kvázi-egyensúly feltételezésével nyerhető kifejezésbe (mint a jelen pontban tárgyalt esetben is láttuk) mutatja, hogy ez a választás megfelelő. Más szóval, nem kell különböző módusokat keresni az alaktól függő és az attól független domén-mozgás leírására.

A másik kérdésre adható válasz azért nem triviális, mert pl. a Gunn-domének (csapdák nélkül) alaktól függetlenül mozognak, míg a rekombinációs domének általában nem. Ez úgy is fogalmazható, hogy ott, ahol a tértöltésnek van zérus mozgékonyaságú (lokalizált) komponense, a domén-mozgás általában nem lesz lokális tulajdonság. Ez szemléletesen úgy fogalmazható, hogy a rekombinációs domének „hernyószerű” mozgást „caterpillarlike movement” végeznek a domén alakjának lényeges változása nélkül, a domén-falak infinitizimális mozgása kíséretében. Ezt a szemléletes képet a [II.22] dolgozatomban javasoltam a (II.39) formula interpretálására. Az azóta végzett vizsgálatok ezt a képet teljes egészében alátámasztották. Látható, hogy a nem-lineáris domének mozgása bonyolult. Nem meglepő tehát, hogy pusztán heurisztikus megfontolások alapján nem lehet korrekt sebesség-kifejezéseket kapni [III.2].

### III. 2. A diffúzió térfüggésének hatása a Gunn-domének sebességére

A Gunn-domének sebessége gyakorlatilag helyesen adódik a különböző elméletekből. A problémák olyan „finomságok” vizsgálatánál lépnek fel, mint pl. a diffúziós együttható térfüggésének figyelembevétele vagy a völgyek közötti átmenetek hatása. A lineáris elmélet keretében is figyelembe vették a  $D_n(E)$  függést. Mint említettem, Gunn megkövetelte, hogy az  $E_2$  szinguláris pont centrum legyen és



ebből a következő kifejezést vezette le az  $u_0$  doménsebességre:

$$-u_0 = v_{ds} - \frac{4\pi q N_d}{\varepsilon} \left( \frac{dD_n}{dE} \right)_{E=E_2} \quad (\text{III.4})$$

ahol  $v_{ds}$  a külső driftsebesség (mely egyenlő a  $v_d(E_2)$  értékkel)  $N_d$  a donor-koncentráció és a  $\frac{dD_n}{dE}$  deriváltat az  $E_2$  szinguláris pontban kell venni. *Butcher és munkatársai*

[II.15] egy másik kifejezést vezettek le az  $u_0$ -ra, amelyben egy zárt görbe menti integrál szerepel az  $(E, n)$  fázistérben. Ez az integrál a teljes fázis-térbeli megoldás ismeretét feltételezi. Amennyiben a domén amplitúdója kicsiny, úgy a [II.15]-ben levezetett formula megegyezik a fenti kifejezéssel.

A Gunn-domének mozgását analizáló számítógépes vizsgálatok is elemezték a  $D_n(E)$  függés hatását [II.15], [II.20], és a völgyek közötti szórás szerepét [III.6]. Ezek a vizsgálatok, adott paraméter-értékeknél számolták ki az  $u_0$  sebességet és így nehéz általános következtetéseket levonni. Az eltérések egyébként is kicsik. Megemlítem például *F. L. Jones és munkatársainak* dolgozatát, akik — mint arról a II.1 pontban már volt szó — rámutattak arra, hogy a (III.4) kifejezés nem korrekt. A valódi „határciklushoz”  $u_0 = 7,804 \cdot 10^6$  cm/sec sebesség tartozik, míg (III.4) alapján  $8,1415 \cdot 10^6$  cm/sec sebesség adódik. Látható, hogy az eltérésnek inkább elvi jelentősége van és pl. félvezető eszköz tervezésénél bátran számolhatunk a közelítő kifejezéssel. Más a helyzet, ha olyan probléma vetődik fel, hogy *mi lesz a domén-sebesség csúcstérfüggése, vagy például hogyan lehet következtetni a stacionerén mozgó domén vizsgálata alapján az elektronok nagyterű viselkedésére?* A II. 2. pontban kifejtett DAP-módszer lehetőséget ad a fenti kérdés vizsgálatára, mivel beláttuk, hogy pl. a GaAs-ban mozgó Gunn-domének esetében a domén-alak-paraméterek elhanyagolhatóak.

A  $v_d(E)$  és  $D(E)$  függvény meghatározására számos elméleti és kísérleti munka született. Ezek közül a *D. E. McCumber* és *A. G. Chynoweth* munkája látszik a gyakorlati számításokhoz a legmegfelelőbbnek. Az alábbiakban megadjuk azokat a paramétereket, amelyeket a McCumber-Chynoweth modellben [II.31], *Y. Nishimura* [II.5] használt.

Ebben a modellben konstans  $\mu_1$ ,  $\mu_2$  mozgékonyaságokkal és egyetlen közös  $T$  elektronhőmérséklettel számolnak a  $D_d$  diffúziós együttható meghatározásánál.

$$\mu_d = \mu_1 \frac{1 + B \left( \frac{E}{E_c} \right)^m}{1 + \left( \frac{E}{E_c} \right)^m}; \quad v_d(E) = \mu_d E \quad (\text{III.5})$$

és nyilván:  $\mu_2 = B\mu_1 \cdot A$   $T$  effektív hőmérséklet konkrét alakját egy  $\tau_T$  átlagos energia-relaxációs idő segítségével fejezik ki:

$$T = T_0 \left[ 1 + \frac{\tau_T v_d(E) E q}{k T_0} \right] \quad (\text{III.6})$$

és így

$$D_d(E) \equiv \mu_d \frac{kT}{q} = \mu_d \frac{kT_0}{q} \left[ 1 + \frac{\tau_T v_d(E) E q}{k T_0} \right] \quad (\text{III.7})$$

A következő értékek választásával:  $\mu_1 = 7500$  cm<sup>2</sup>/Vsec;  $B = 1/60$ ;  $m = 2,3$ ;  $E_c = 3500$



V/cm;  $\tau_T = 2 \cdot 10^{-12}$  sec;  $kT_0 = 0,026$  eV, kiszámítható mind a  $v_d(E)$ , mind a (II.53) egyenlet alapján a  $(dD_d/dE)$ -ből adódó sebesség-járulék.

A (II.53) egyszerűen átírható

$$-u_0 = v_d(E_0) - \frac{4\pi q N_d}{\varepsilon} \left( \frac{dD_d}{dE} \right)_0 + \frac{D_d(E_0) S_3}{S_2} \quad (\text{III.8})$$

alakban, ahol  $N_d$  az ionizált donorok koncentrációja. A fenti egyenlet formailag megegyezik a Gunn által levezetett kifejezéssel, eltekintve attól, hogy most minden tagot a csúcstérnél kell venni, másrészt az  $S_3/S_2$  tag is fellép. Ez a tag — mint látni fogjuk — csak igen kis járulékot ad a doménsebességhez.

A III.2. Táblázatban megadtam az  $u_0$  doménsebességet, különböző  $E_0$  csúcsterek-nél. A csúcstér értékét a kritikus  $E_c$  (karakterisztikus) térerősség többszöröse-ként adtam meg. A 2. és 3. oszlop tartalmazza a  $v_d(E_0)$  és a  $-\frac{4\pi q N_d}{\varepsilon} \left( \frac{dD_d}{dE} \right)_0$  járulékokat. Végül az utolsó oszlopban a diffúziós együttható értékét tüntettem fel.

Látható, hogy a csúcstér növekedésével a diffúzió térfüggségéből eredő járulék 2% alá csökken. Másrészt világos az is, hogy az  $N_d$  donor-koncentráció csökkenésé-vel, azaz tisztább anyag esetén ez a járulék is csökken. A  $10^{15}$  cm $^{-3}$ -os koncentráció a Gunn-eszközöknél szokásos érték. Gunn mérései szerint [III.7] a domén-sebesség az  $E_0 = 14$ – $25$  kV/cm csúcstér változáskor nem változik lényegesen. Ez megegyezik a táblázatban feltüntetett sebesség-változás jellegével.

Végül megjegyezzük, hogy az alak-paraméterektől eredő járulék, adott esetben  $D_{d0}$   $S_3/S_2$ , a szokásos térerősségeknél ( $E_0 \approx 4E_c$ ) igen kicsiny, mert a  $D_{d0}$  lecsökken és ha az  $S_3/S_2 \approx 1/d$  értéket vesszük, akkor  $d = 40 \mu\text{m}$  esetén  $D_{d0} S_3/S_2 \approx 10^4$  cm/sec, ami a  $6 \cdot 10^6$  cm/sec nagyságú domén-sebesség mellett valóban kis érték.

A völgyek közötti szórás és a diffúzió hatását Székely és Tarnay hasonlították össze [III.6]. Számítógépes vizsgálataik alapján megállapították, hogy a doménen belüli kvázi-egyensúly kialakításához a völgyek közötti szórás és a diffúzió közel azonos mértékben járul hozzá.

A fenti kérdés, a DAP-módszerrel kapott kifejezések alapján is vizsgálható és mint a (II.59), vagy (II.59') formulák elemzése mutatja, nem túl nagy csúcsterek-nél\* a diffúziós együtthatót és a  $\tau_0/\tau_{M0}$  paramétert tartalmazó tagok azonos nagyságú járulékot adhatnak.

III. 2. TÁBLÁZAT

$E_0$	$-u_0$ 10 <sup>6</sup> cm/sec	$v_d(E_0)$ 10 <sup>6</sup> cm/sec	$-\frac{4\pi q N_d}{\varepsilon} \left[ \frac{dD_d}{dE} \right]_0$ cm/sec	$D_d(E_0)$ cm <sup>2</sup> /sec
$2E_c$	14,62	9,5886	$5,027 \cdot 10^6$	158,20
$3E_c$	8,889	7,0429	$1,8464 \cdot 10^6$	83,58
$4E_c$	6,592	5,9082	$6,8339 \cdot 10^5$	57,52
$5E_c$	5,5786	5,2962	$2,8240 \cdot 10^5$	45,27
$6E_c$	5,193	5,0981	$9,4780 \cdot 10^4$	40,97

\* E kérdést részletesen elemezte Zombory L. „Tömbeffektusú eszközök modellezése” c. kandi-dátusi értekezésében, mely a közeljövőben kerül megvédésre.



### III. 3. A rekombinációs domének mozgása arannyal kompenzált Ge-ban

Az I. fejezetben felsoroltam néhány jellegzetes centrumot, amelyek NDV-hez és így domének kialakulásához vezetnek. Nincs mód arra, hogy ezek mindegyikével részletesen foglalkozzam, már csak azért sem, mert a publikációk nagy része inkább csak leírja a megfigyelt tényeket anélkül, hogy a szereplő mennyiségek részletes, megbízható meghatározását nyújtaná.

Bizonyos esetekben még az sincs tisztázva, hogy milyen típusú centrumok hozták létre a NDV-t. A sztatikus domének mellett a legkorábban felfedezett domén-instabilitást az arannyal kompenzált Ge-ban figyelték meg *B. K. Ridley* és *I. A. Kurova*, egymástól függetlenül. Később ezt a rendszert részletesebben vizsgálták, és ma, éppen Kurova és munkatársai révén a legjobban ismert rendszer, ahol az elmélet és kísérlet összevetése leginkább kívánczik. Ugyanakkor a domén-sebesség elmélete és a kísérletileg megfigyelt érték lényeges eltérését az eddigi elméletek nem tudták megmagyarázni és magyarázat nélkül maradt az a tény is, hogy a domén-sebesség és a domén-szélesség egymással arányos módon növekedtek a mintára kapcsolt feszültség hatására. Nézzük részletesebben a kísérleti tényeket *I. A. Kurova* és *M. Vrana* [III.8] munkája nyomán, amelyben a hosszú évek vizsgálati eredményeit foglalták össze.

A 30 K-en, termikus generáció mellett végzett kísérleti tényeket tekintve, a következő tulajdonságok mutatkoznak lényegesnek:

1. Adott feszültségnél a domén-sebesség és az áram egymással arányos  $|u_0| = k j_s$  a 20—35 K tartományban.
2. A domén-sebesség és a domén szélessége érzékeny a mintára kapcsolt  $V_a$  feszültségre, míg az áram gyakorlatilag változatlan marad. A domén-szélességre jó közelítéssel  $d = \chi v_a$  összefüggés érvényes a 30—160 V tartományban ahol  $\chi = 7,90 \mu\text{m/V}$ .
3. Az áram és a sebesség hőmérséklet-függését a 20—35 K tartományban az  $1/N_{Au0}$  mennyiség határozza meg.
4. Az  $E_0$  csúcster gyakorlatilag független a  $V_a$  feszültségtől, a 2) -ben megadott feszültség-tartományban és független a hőmérséklettől, valamint az  $N_{Au0}/N_{Au0} = K_t$  paraméter értékétől:  $E_0 = 1,3 \cdot 10^3 \text{ V/cm}$ .
5. A  $j_s$  áram számszerű értékére közel helyes értéket ad pl. a [II.1, II.9] elmélet megfelelő kifejezése, a sebességben azonban három nagyságrendnyi eltérést találtak, bármely eddigi elmélet sebesség-kifejezését is használták.

A vizsgált minták jelentős részében  $K_t = 0,1 - 0,2$  körül van. A III. 3. Táblázatban a [III.8] munka alapján néhány jellegzetes adatot ismertetek.

A kísérleti adatok értelmezésére *Kurova* és *munkatársai* megkísérelték a lineáris [II.1] és nem-lineáris elmélet [II.7]—[II.9] kifejezéseivel összehasonlítani a kapott eredményeket, felhasználva korábbi vizsgálataikat is, valamint *Ridley* és *Pratt* adatait (III.9). Az áramra elég jó egyezés adódott, de a domén-sebesség értékére három nagyságrenddel nagyobb értéket kaptak mindkét elmélet alapján. A kérdés pontosabb illusztrálására meg kell becsülni a szereplő mennyiségek értékét.

A legszembeűnőbb módon az eltérés tényét a nem-lineáris elméletből adódó (és a DAP-et elhanyagoló) összefüggés alapján láthatjuk be. Ennek lényege az a megállapítás, hogy a sebesség és az áram arányos egymással. A kvázi-egyensúly feltételezésével a  $k$  arányossági tényezőre éppen  $q_0^{-1}$  adódik (lásd pl. (II. 46)) ha a  $K_t$  értékét sem



akarjuk elhanyagolni — ami adott esetben 10%-os változást jelent — akkor a (II.87) alapján:

$$-u_0 = j_s(K_t + 1)/\varrho_0$$

más szóval a  $k$  arányossági tényező éppen  $(K_t + 1)\varrho_0^{-1}$ .

A táblázatban megadott és mért  $j_s$ ;  $\varrho_0 \approx qN_{Au0}$ ;  $K_t$  értékeket behelyettesítve (4., 2. és 3. oszlop), a sebességre *három nagyságrenddel nagyobb érték adódik*, mint ez a 6. oszlopból látható. Az 5. oszlop a mért domén-sebesség.

III. 3. TÁBLÁZAT

1	2	3	4	5	6	7
$N_{Au0}^-$ $\times 10^{14}$ $\text{cm}^{-3}$	$N_{Au0}^-$ $\times 10^{14}$ $\text{cm}^{-3}$	$K_t$	$j_s$ $\times 10^{-4}$ $\text{Acm}^{-2}$	$-u_0$ $\times 10^{-3}$ $\text{cm/sec}$	$-u_0$ $\text{cm/sec}$	$-u_{ca}$ $\times 10^{-3}$ $\text{cm/sec}$
5,1	0,7	0,14	1,3	3,8	13,2	$r=0,5$ 3,75
3,5	0,3	0,086	0,66	6,3	15	$r=1$ 7,5
3,9	0,5	0,13	0,63	3,3	8,9	$r=0,5$ 3,73

Kérdés, hogy az áramra használt kifejezések, vagy a sebesség kifejezések hibásak? Nem nehéz belátni, hogy a  $j_s \approx \frac{\tau_0}{\tau_g} \cdot \varrho_0 v_0$  érték alapján számolt áram egy 2-es szorzótól eltekintve a helyes értéket adja, míg a sebesség kifejezés egészen hibás értékhez vezet.

Felhasználva az irodalomban meglevő adatokat (lásd pl. [III.8—III.10]) a következő értékeket elfogadhatjuk a szereplő mennyiségekre:  $\tau_0 = 4 \cdot 10^{-6}$  sec;  $v_0 = 5 \cdot 10^6$  cm/sec;  $E_0 = 10^3$  V/cm;  $\mu_n = 5 \cdot 10^3$  cm<sup>2</sup>/Vsec  $\varrho_0 = 5 \cdot 10^{13}$  q;  $\tau_{M0} = 4 \cdot 10^{-11}$  sec;  $\tau_g = 2$  sec;  $D_n = 20$  cm<sup>2</sup>/sec;  $N_{Au0}^- = 5 \cdot 10^{14}$  cm<sup>-3</sup>.

Elhanyagolva  $K_t = 0,1$  értéket az egység mellett:

$$j_s = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 \varrho_0 = 0,8 \cdot 10^{-4} \text{ Acm}^{-2}, \quad \text{míg} \quad -u_0 = \frac{\tau_0}{\tau_g} v_0 = 10 \text{ cm/sec}$$

értékek adódnak.

Kurova és munkatársai rendkívülien részletesen elemezték a korábban meglevő sebességekifejezéseket. Megállapították pl., hogy a  $-u_0 = D_n/\tau_0 v_0$  nem csak azért ad rossz sebességekifejezést, mert a behelyettesítés után  $-u_0 = 1$  cm/sec adódik, hanem azért, mert a hőmérsékletfüggés hibás. Az 1., illetve 3. tulajdonságok azt mutatják, hogy  $j_s$  és  $u_0$  hőmérsékletfüggését  $1/\tau$  határozza meg, és nem  $1/\tau_0$ !

A szereplő mennyiségek alapján az is könnyen megállapítható, hogy  $\tau_0^2/\tau_g \tau_{M0}$  és  $2\gamma \tau_0 D_n/d^2$  értéke elhanyagolható, vagy kis korrekciót ad az egység mellett és így pl. a (II.41) nevezőjében 1 áll.

Mindezek alapján megállapítható, hogy a *kvázi-egyensúly feltételezése, vagy a szimmetrikus domén feltételezése hibás értéket ad a domén-sebességre.*



Vizsgáljuk meg most a csapdák lehetséges hatását. Az a tény, hogy  $u_0$  és  $j_s$  különböző feszültség-függést mutat, kizárja azt, hogy a szokásos kvázi-egyensúlyt feltételezve (amely alaktól független sebességhez vezet) a kísérleti eredményeket interpretáljuk. Valóban, a csapdák hatásának vizsgálata során éppen arra a megállapításra jutottam, hogy ha elhanyagoljuk a domén-alak-paramétereket, akkor ismét a  $j_s = -u_0 \rho_0$  kifejezést kapjuk és így valójában az áram is és a sebesség is azonos módon változik egy, a csapdák hatását is figyelembe vevő faktorial.

A domén mozgására *helyes nagyságrendet akkor kaphatunk, ha figyelembe vesszük a domén alakjának aszimmetriáját*. Ekkor azonban szükségtelen bárminemű csapda feltételezése, amelyről eddig csak azt tudták meghatározni, hogy igen kis koncentrációban vannak jelen az  $N_{Au}$ -hoz képest és aktiválási energiájuk 0,02 eV-al van a vezetési sáv alatt. Alig elképzelhető, hogy ilyen tulajdonságú és koncentrációjú centrum lényegesen hozzájárulhatna a tértöltés kialakulásához. Most a domén alakját figyelembe vevő (II.39) formulából kiindulva konkrét domén-alakot feltételezve kell számolni. Mivel a (III.8) méréseknél a szondák átmérője összemérhető a domén-falak szélességével és csak az állapítható meg, hogy az előlő fal és a hátsó domén-fal különbözik egymástól, feltesszük, hogy a domén alakja a neutrális pont körül úgy viselkedik, mint az  $y = \left(\frac{x}{d}\right)^r e^{-\frac{x}{d}}$  függvény a maximuma körül. A paraméterek behelyettesítése alapján meggyőződhetünk arról, hogy a (II.39) nevezőjében az  $\alpha_2$  aszimmetria paraméter dominál és így a (II.42) kifejezés használható. Az is látszik, hogy  $\gamma_\tau D_n / v_0^2 \tau_{M0} \ll 1$ , és így adódik:

$$-u_{0a} \approx \frac{rd}{2\tau_g}; \quad (r \neq 0). \quad (\text{III.9})$$

Legyen pl.  $r = 1/2$ , akkor  $d = 2 \cdot 10^{-2}$  cm és  $\tau_g = 2$  sec esetén  $-u_0 = 2,5 \cdot 10^{-3}$  cm/sec érték adódik, egyezésben a kísérleti értékek nagyságrendjével. A fenti sebesség-kifejezéssel nemcsak a helyes nagyságrendet, hanem a hőmérséklet-függést és a feszültség-függést is értelmezni lehet.

Valóban, a kísérletileg megfigyelt 4. tulajdonság alapján sem a domén sebessége, sem alakja, sem az  $E_0$  tér nem függ a hőmérséklettől, így a 3. kísérleti megfigyeléssel egyezően a hőmérséklet-függést most is az  $1/\tau_g$  adja.

Másrészt a 2. megfigyelés alapján a domén-szélesség és a sebesség a feszültséggel lineárisan nő, ha tehát a fenti kifejezésbe behelyettesítjük a  $d = \kappa V_a$  empirikus kifejezést és *feltesszük*, hogy  $r$  csak kevésbé változik  $V_a$ -val, akkor az áram és sebesség viselkedésének lényeges különbségét is értelmezni tudjuk.

Megjegyzem, hogy a domén-sebesség és a domén-szélesség kapcsolatát a mintára kapcsolt feszültséggel nemcsak az arannyal kompenzált Ge esetén figyelték meg, hanem CdS-ban is. K. W. Böer CdS-ban vizsgálta a mozgó doméneket és az  $u_0 \sim d \sim V_a$  összefüggést találta. Ez elég általános tulajdonságnak látszik, úgy hogy érdemes ezzel kissé részletesebben foglalkozni. Mivel a (III.9) formula szerint az  $u_{0a} \sim d$  összefüggés igazolt, már csak azt kell belátni, hogy miért változik a domén-szélesség lineárisan az alkalmazott feszültséggel. Legyen  $d$  a domén-szélesség,  $L$  a minta hossza,  $E_0$  a csúcstér,  $E_s$  a doménon kívüli térerősség, ekkor a doménfalaktól eltekintve nyilván [I.1], [III.11]:

$$(E_0 - E_s)d + E_s L = V_a \quad (\text{III.10})$$



A 4. tulajdonság alapján  $E_0$  gyakorlatilag független az alkalmazott feszültségtől,  $E_s$  jó közelítéssel megegyezik a térerősséggel, ahol a befogás már növekedni kezd. Kurova és munkatársai mérései alapján  $E_0 = 1,3 \cdot 10^3$  V/cm,  $E_s = 10$  V/cm. A kísérleteknél 0,4 cm hosszú mintát alkalmaztak, így az  $E_s L$  tag elhanyagolható és adódik  $d \approx V_a / (E_0 - E_s)$ . Behelyettesítve  $E_0$  értékét, kapjuk  $d = 7,7 V_a$ , ahol  $V_a$ -t voltokban betéve  $d$ -t mikronban kapjuk. Ez az összefüggés igen jól egyezik a 2. tulajdonságnál megadott  $\kappa = 7,9 \mu\text{m/V}$  értékkel.

A feszültség-függés interpretálásánál feltettem, hogy az  $r$  empirikus paraméter csak kicsit változik  $V_a$  vizsgált értékeinél. Az a tény, hogy  $\kappa$  értéke helyesen adódik, valamint a csúcstér ( $E_0$ ) értéke is változatlan, azt mutatja, hogy a vizsgált feszültség-tartományban a domén „hízik” csak, és a lényeges változás a domén-szélességben jelentkezik. Természetesen a (III.9) levezetésénél használt függvény helyett más, pl. laposabb\* domén-alakot leíró függvénnyel is lehet számolni [II.22]. *M. Vrana* személyes közlése alapján ilyen függvény megfelelőnek mutatkozik az aszimmetrikus domén sebességének meghatározására.

### III. 4. A lassú domének eredetéről félszigetelő GaAs-ben

A megfigyelhető áraminstabilitások tekintetében a GaAs nyújtja a legszélesebb spektrumot. A jó minőségű (nem kompenzált) alapanyagban a tiszta Gunn-effektuson kívül az akusztóelektromos domének is megfigyelhetők. Kompenzált (pl. oxigén jelenlétében készült) félszigetelő GaAs-ben lassú doméneket figyeltek meg, amelyek eredete még ma sincs teljes biztonsággal kiderítve. A kérdés ma is a kutatás homlokterében áll, azért is, mert a Gunn-effektus szempontjából minden frekvencia-korlátozó tényező lényeges.

*Barraud* említett vizsgálata óta [I.6], számosan foglalkoztak a kérdéssel [III.12]—[III.22], [II.25] és a domének eredetére különböző modelleket javasoltak:

- Tiszta rekombinációs instabilitás: [I.6], [III.15—16].
- Gunn-effektus csapdák jelenlétében: [II.36].
- Gunn-effektus csapdák jelenlétében, gyorsabb befogás a felső völgyekből: [II.25], [III.19—21].
- Akusztóelektromos-domének: [III.18].
- Csapdák áttöltődése, egyéb mechanizmus: [III.17].

A kísérletek interpretálásánál a fő nehézséget az okozta, hogy a „kritikus tér” 30 V/cm—3 kV/cm között igen széles tartományban változott, amit a legújabb kísérletek szerint [III.20], [III.21] a minták inhomogenitása okozott. Az inhomogenitások döntő szerepe a nagyterű vizsgálatoknál jól ismert jelenség. Míg kis elektromos tereknél, 10—20%-os inhomogenitás, a vezetési jelenségekben csak ugyanilyen mértékű kellemetlenséget okoz, a domének szempontjából ezek hatása mintegy felerősödik:

\* A legegyszerűbb függvény — amely a szélesedő domént leírja — a domén falak meredekségének változása nélkül, a következő lehet:

$$y = y_0(1 - e^{-\frac{x}{d}} - e^{\beta \frac{x-d}{d}} + e^{-\alpha} + e^{-\beta})$$

ahol  $\alpha, \beta > 2$  a meredekségre jellemző paraméterek,  $d$  a domén szélesség. Könnyű belátni, hogy ilyenkor  $S_3/S_2 = (\beta - \alpha)/d$ ;  $S_4/S_2 = (\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)/d^2$ . Ezzel a (III. 9)-ben szereplő  $r$  paraméter is szemléletes jelentést kap.



pl. a domén megállhat és így mozgó domén helyett sztatikus domén keletkezik. Az inhomogenitások szerepének növekedését kisebb tilos-sávú félvezetőben pl. a [III.23] —[III.24] dolgozatokban vizsgálták, ahol megmutatták, hogy az áram-feszültség karakterisztika jelentős eltérést mutat a lineáristól.

Tudomásom szerint a *c)* mechanizmust *Crescenzi* [III.19] és *én* [II.25] javasoltuk egymástól függetlenül 1969-ben. Ebben az irányban a leglényegesebb kísérleti lépést a már említett [III.20], [III.21] dolgozatok jelentették, melyekben azt igazolták, hogy *homogén minta esetén* a kritikus tér igen közel van a Gunn-effektushoz szükséges 3 kV/cm térerősséghez. A második lényeges körülmény, hogy az I—V karakterisztika interpretálásához fel kellett tételezniük, hogy a felső völgyekből való befogás (az ismeretlen centrumra) mintegy 30-szor gyorsabb, mint a központi völgyekből való befogás tempója. Megjegyzem, hogy ennek megállapításához nem kell ismerni a szóban forgó nívók mélységét, mert az I—V karakterisztikát olyan rövid  $t_H$  impulzusokkal mérték, hogy a töltés-generáció a centrumokból elhanyagolható volt. Csak annyit kellett feltételezni, hogy  $t_H \ll \tau_{11}$ .

A domén-sebesség megbízható becslésének két akadálya van. Az egyik, hogy eddig nem mérték az  $u_0$  hőmérséklet-függését, amely — mint az előzőekből láttuk — a domén mozgásban meghatározó. *Shishiyanu* közlése szerint [III.25] ilyen mérés most van folyamatban. A másik, a fenténél még lényegesebb probléma, hogy a fél-szigetelő (pl. Monsato-gyártmányú) GaAs csapdarendszere igen bonyolult. Legalább három-négy olyan nívó van, amelynek koncentrációja számottevő és eredete nem azonosítható meggyőzően [III.16], [III.17], [III.26,27].

Az említett mély nívók közelítő energia-szintjei (a vezetési sávtól mérve):

$E_{t1} \approx 0,20$  eV, (több nívót is megfigyeltek  $E_{t1}$  körül, lehet oxigén eredetű)

$E_{t2} \approx 0,50$  eV, (hibahelyek, Fe)

$E_{t3} \approx 0,75$  eV, (lehet Cr, vagy oxigén eredetű)

$E_{t4} \approx 1,10$  eV, (?)

Lényeges kísérleti megfigyelések:

1. A sötétáram hőmérsékletfüggése  $E_{t2}$ -vel írható le [III.16], [III.20].

2. Csak olyan mintánál figyeltek meg oszcillációt, ahol  $E_{t2}$  is jelen volt [III.14]

3. A fotovezetés elektronjait az  $E_{t3}$  nívó biztosítja [III.16].

Az 1969 óta ismertté vált kísérleti tények birtokában a következő modellt javaslom az oxigénnel kompenzált GaAs-ben mozgó lassú domének leírására:

A *c)* mechanizmus érvényes. Az  $E_{t3}$  nívók csak a fotovezetés létrehozásában játszanak szerepet és a Gunn-domének lelassulásáért az  $E_{t1}$  és/vagy az  $E_{t2}$  nívók felelősek.

Amennyiben pl. az  $E_{t1}$ ;  $E_{t2}$  nívók egyazon centrum két töltésállapotának felelnek meg, úgy a [II.25]-ben tett javaslatommal egyezésben mind az *a)* mind a *c)* mechanizmus szimultán működik és a kritikus tér is lecsökken.

Az  $E_{t1}$ ,  $E_{t2}$  szerepére és számszerű értékekre csak az  $u_0(T)$  ismerete adhat megbízható választ.



#### IV. KÜLSŐ PERTURBÁCIÓ HATÁSA A STACIONEREN MOZGÓ DOMÉNEKRE

Az első fejezetben már szó volt arról, hogy a kezdetben homogén rendszerekben bizonyos típusú fluktuációk növekedhetnek és a rendszer új, inhomogén állapotba mehet át.

A lineáris elméletek lényegében ezeket a fluktuációkat vizsgálják — nyitva hagyva azt a kérdést — hogy az új állapot (ha ilyen egyáltalán létezik) stabilis lesz-e vagy sem. A nem-lineáris elméletben, a Riemann-típusú megoldás feltételezésével, illetve a periódikus megoldás egzisztenciájának különböző feltevések mellett elvégzett bizonyításával, a domén-mozgás lényeges paramétereire megfelelő kifejezéseket kaphatunk, de ismét nyitva marad az a kérdés, hogy a megoldás stabilis-e a külső vagy belső fluktuációkra nézve. A kérdést elsőnek *Knight* és *Peterson* [IV.1], valamint *Bonch-Bruevich* [IV.2] vizsgálták.

*Bonch-Bruevich* idézett dolgozatában a következő problémát vetette fel: tegyük fel, hogy a vizsgált rendszerben stacionerén mozgó domén (rekombinációs vagy Gunn-domén) halad, kérdés, hogy a külső periódikus perturbáció hatására lehetséges-e rezonancia jelenséget kapni, vagy keletkezhetnek-e a rendszerben kényszer-rezgések? Külső perturbáció lehet például periódikus megvilágítás, periódikus elektromotoros erő, amelyet a körbe kapcsolunk, stb.

A [IV.2] dolgozatban az az eredmény adódott, hogy a Gunn-effektus esetén nincs rezonancia lehetőség (a vonatkozó lineáris differenciál-operátor sajátértékei valóságosak), míg a rekombinációs doménnek ilyen lehetőség van.

1967-ben — féléves moszkvai tanulmányutam során — e kérdés vizsgálatába kapcsolódtam bele. Az akkor alig négy éves múltira visszatekintő domén-instabilitás tárgyalásánál egyáltalán nem volt világos, hogy mi okozza a két fajta domén különböző viselkedését. A fenti kérdésekre adott azon válaszom [IV.3], hogy a Gunn-effektus és a rekombinációs domének hasonló rezonancia-tulajdonságokkal rendelkeznek, ha az általános kétállapot modellben — a kvázi-egyensúly feltételezése nélkül — vizsgáljuk azokat, ma már triviálisnak hangzik, akkor azonban nagyban hozzásegített a domén-instabilitások mélyebb megértéséhez.

E fejezetben a fenti problémát tárgyalom röviden. A számítási eljárást részletebben a Gunn-effektusra vonatkozóan mutatom be, követve a [IV.2] dolgozatot.

##### IV. 1. Külső perturbáció hatása a Gunn-doménekre

A kérdéskör igen széles és annak ellenére, hogy gyakorlati szempontból is fontos, még ma sincs a probléma lezárva, elsősorban a matematikai nehézségek miatt. A gyakorlat oldaláról három kérdést említek. Az első, hogy ha egy mintában nagy térerősségű domén halad, mi lesz a rendszer váltóáramú impedanciája, a második, ha egy mintában több domén keletkezik, stabilis marad-e a rendszer, s végül az említett rezonancia probléma.

A több doménes rendszert kísérletileg *Ohtomo* vizsgálata [IV.4]. Megállapította, hogy mindig az egyik domén kezd növekedni a többi rovására, azaz nem tud kialakulni stabilan több doménes rendszer. Ezt a megfigyelést elméletileg *Zwyagin* igazolta [IV.5]. Részletesebb összefoglalást az [I.3] monográfia VII. fejezete tartalmaz.



A Gunn-effektus tárgyalásánál Bonch-Bruевич a szokásos módon, bevezet egy effektív  $v_d(E)$  driftsebességet és az alábbi egyenletekből indul ki (lásd II. 1. pont):

$$\frac{\partial \varrho_n}{\partial t} = \frac{\partial j_n}{\partial x} \quad (\text{IV.1})$$

$$j_n = \varrho_n v_d(E) + D_n(E) \frac{\partial \varrho_n}{\partial x} \quad (\text{IV.2})$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi}{\varepsilon} (\varrho_0 - \varrho_n) \quad (\text{IV.3})$$

azaz, a diffúziós együttható térfüggését az  $\eta=0$  közelítésben veszi figyelembe (v. ö. (II.21) egyenletek).

A perturbálatlan rendszert most a stacioner domén-mozgást leíró Riemann típusú megoldás adja, melyet az „r” index jelöl. Feltesszük, hogy a körben egy  $f_m e^{-i\omega t}$  alakú térerősség perturbáció van kapcsolva ( $f_m$  konstans), amelynek hatására a megoldás  $E = E_r + \delta E(x, t) + f_m e^{-i\omega t}$ , illetve  $\varrho_n = \varrho_{nr} + \delta \varrho_n(x, t)$  alakú lesz. Linearizáljuk a Riemann-féle megoldás környezetében a (IV.1)–(IV.3) egyenleteket, kapjuk:

$$\frac{\partial \delta \varrho_n}{\partial t} = \frac{\partial \delta j_n}{\partial x} \quad (\text{IV.1}')$$

$$\delta j_n = \sigma_r \delta E + D_n \frac{\partial \delta \varrho_n}{\partial x} + v_{dr} \delta \varrho_n + f_m e^{-i\omega t} \quad (\text{IV.2}')$$

$$\frac{\partial \delta E}{\partial x} + \frac{4\pi}{\varepsilon} \delta \varrho_n = 0 \quad (\text{IV.3}')$$

ahol  $\sigma_r(z) = \varrho_{nr} v_{dr} + \varrho'_{nr} D_{nr}$ ;  $v_{dr} = \mu(E_r) E_r$ , és a pont az  $E$  szerinti deriválást jelenti.

A megfelelő határfeltétel a  $\delta E$  periodicitását írja elő, az  $L$  hosszúságú mintában:

$$\delta E(0, t) = \delta E(L, t). \quad (\text{IV.4})$$

Mivel a fenti egyenletek együtthatói csak a  $z = x - u_0 t$  változótól függenek, a megoldást is ilyen alakban keressük:

$$\delta E = y(z) e^{-i\omega t}; \quad \delta \varrho_n = y_1(z) e^{-i\omega t} \quad (\text{IV.5})$$

Vezessük még be az alábbi két függvényt:

$$\alpha(z) = \frac{4\pi\sigma_r}{\varepsilon} - v'_{dr}; \quad \beta(z) = v_{dr} + D'_{nr}$$

ahol a ' a  $z$  szerinti differenciálást jelenti. Az  $y$  és  $y_1$ -re adódik:

$$y' + \frac{4\pi}{\varepsilon} y_1 = 0 \quad (\text{IV.6a})$$

$$D_{nr} y_1'' + (u_0 + \beta) y_1' + (i\omega - \alpha) y_1 + \sigma_r y = -\sigma_r' f_m \quad (\text{IV.6b})$$

és a határfeltétel:  $y(0) = y(L)$ .



Vizsgáljuk a fenti egyenletrendszernek megfelelő homogén rendszert, valamint legyen  $i\omega = -\lambda$ , ekkor a  $\lambda$  paraméternek megfelelő megoldást  $y_\lambda$ ;  $y_{1\lambda}$ -val jelölve:

$$y'_\lambda + \frac{4\pi}{\varepsilon} y_{1\lambda} = 0 \quad (\text{IV.7a})$$

$$D_{nr} y''_{1\lambda} + (u_0 + \beta) y'_{1\lambda} - \alpha y_{1\lambda} \sigma'_r y_\lambda = \lambda y_{1\lambda}. \quad (\text{IV.7b})$$

Mivel a fenti differenciálegyenlet-rendszer általában nem hermitikus, a  $\lambda$  sajátértékek komplexek is lehetnek. Ez ad lehetőséget a rendszer „rezonancia-frekvenciáinak” meghatározására, az  $\omega_{\text{rez}} = i\lambda$  alapján.

Az inhomogén rendszer pólusait (és általában az impedancia pólusait) ez a feltevés határozza meg. Nyilvánvaló, hogy valós  $\omega_{\text{rez}}$  értékek — ha egyáltalán léteznek — a rezonanciának felelnek meg: az alsó (illetve felső) félsíkban levő pólusok, vagyis, amikor  $\lambda$  negatív (illetve pozitív) valós résszel rendelkezik, megfelel a rendszer stabilis (instabilis) viselkedésének, az adott fluktuációra nézve.

Sajnos a (IV.7) egyenletek saját függvényeit nem lehet megadni, hiszen az együtthatókról is csak annyit tudunk, hogy a  $z$  periódikus függvényei és néhány, a Riemann-megoldásból következő összefüggésnek tesznek eleget. A [IV.2]-ben javasolt gondolat a következő: a (IV.7) egyenletek aszimptotikus megoldásai (nagy  $|\lambda|$ -értékeknél) felírhatók a szereplő függvények pontos ismerete nélkül és ennek alapján vizsgáljuk a saját értékeknek a probléma szempontjából érdekes tulajdonságait. A [IV.6] monográfiában leírt módszer alkalmazása céljából előbb átalakítjuk a (IV.7) egyenleteket a független változó alábbi transzformációjával:

$$\xi = \frac{1}{a} \int_0^z D_{nr}^{-1/2}(z') dz'; \quad a = \int_0^L D_{nr}(z) dz.$$

Akkor az  $y_\lambda$ -ra az alábbi egyenlet írható:

$$y'''_\lambda + p_1 y''_\lambda + (p_2 + q^2) y'_\lambda + p_3 y_\lambda = 0 \quad (\text{IV.8})$$

ahol most már a  $'$  a  $\xi$  szerinti deriválást jelenti, nem csak az  $y_\lambda$ -knál, hanem az alábbi mennyiségeknél is:

$$\begin{aligned} p_1 &= (u_0 + \beta) \cdot a D_{nr}^{-1/2} - \frac{3}{2} \cdot \frac{D'_{nr}}{D_{nr}} \\ p_2 &= \frac{D'^2_{nr}}{D_{nr}^2} - \frac{D''_{nr}}{2D_{nr}} - (u_0 + \beta) \frac{a D'_{nr}}{2D_{nr}^{3/2}} - a^2 \alpha \\ p_3 &= - \frac{4\pi a^2}{\varepsilon} \sigma'_r(\xi); \quad q^2 = -a^2 \alpha \end{aligned}$$

Aszimptotikusan ( $|q| \gg 1$ ) két megoldás adódik ( $j=1, 2$ )

$$\begin{aligned} y_{\lambda,j} &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\xi p_1(\xi') d\xi' + \omega_j q \xi \right\} \left\{ 1 + \frac{\varphi_j}{q} + O(1/q^2) \right\} \\ \varphi_j(\xi) &= -\frac{3}{4} \cdot \omega_j p_1 - \frac{\omega_j}{8} \int_0^\xi [p_1^2(\xi') - 4p_2(\xi')] d\xi' \end{aligned} \quad (\text{IV.9})$$

$$\text{és } \omega_1 = i, \omega_2 = -i.$$

A határfeltételek figyelembevétele a következő sajátértékeket adja:

$$\lambda_l = -\frac{1}{a^2} \left\{ (2\pi l)^2 + \frac{1}{4} \int_0^1 p_1^2 d\xi - \left( \int_0^1 p_1 d\xi \right)^2 - \int_0^1 p_2 d\xi - 2\pi i l \int_0^1 p_1 d\xi \right\}, \quad (\text{IV.10})$$

ahol az aszimptotikus megoldás megköveteli, hogy  $l$  nagy abszolút értékű egész szám legyen. Az egyetlen tag, amely  $\lambda_l$ -et komplex számmá teheti, az alábbi integrál:

$$I = \int_0^1 p_1(\xi) d\xi.$$

Könnyű belátni, felhasználva azt a tényt, hogy  $D_{nr}$ ,  $v_{dr}$ -be a Riemann-megoldás helyettesítendő be, hogy ez az integrál zérust ad [IV.2], és így azt kapjuk, hogy a  $\lambda_l$  saját értékek valóságok, a rendszer nem mutat rezonancia-tulajdonságot, hanem mint egyszerű RC-kör tisztán relaxációs jellegű lesz.

#### IV. 2. Külső perturbáció hatása a rekombinációs doménekre

Az alapegyenletek igen egyszerűen felírhatók. Állandó  $D_n$  és  $\mu_n$  mellett és a  $\Psi$  függvényt linearizálva a koncentrációkra nézve, a (II.1)–(II.4) egyenletek alapján írhatjuk:

$$\frac{\partial \varrho_e}{\partial t} \equiv \frac{\partial \varrho_n}{\partial t} + \frac{\partial \varrho_2}{\partial t} = \frac{\partial j_n}{\partial x} \quad (\text{IV.11})$$

$$j_n = \varrho_n v_d(E) + D_n \frac{\partial \varrho_n}{\partial x} \quad (\text{IV.12})$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{4\pi}{\varepsilon} (\varrho_0 - \varrho_n - \varrho_2) \equiv \frac{4\pi}{\varepsilon} (\varrho_0 - \varrho_e) \quad (\text{IV.13})$$

$$\frac{\partial \varrho_2}{\partial t} = \frac{\varrho_n}{\tau_r(E)} - \frac{\varrho_2}{\tau_g} \equiv \Psi_l \quad (\text{IV.14})$$

Most is elvégezhető a Riemann-típusú megoldás körül a linearizálás és a  $\delta \varrho_e \equiv \delta \varrho_n + \delta \varrho_2$ ,  $\delta \varrho_2$ ,  $\delta E$  változókra az alábbi egyenleteket kapjuk:

$$\frac{\partial \delta \varrho_e}{\partial t} - \frac{\partial \delta j_n}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.11}')$$

$$\delta j_n = \sigma_r \delta E + D_n \frac{\partial \delta \varrho_n}{\partial x} + \sigma_r f_m e^{-i\omega t} + v_{dr} \delta \varrho_n \quad (\text{IV.12}')$$

$$\frac{\partial \delta E}{\partial x} + \frac{4\pi}{\varepsilon} \delta \varrho_e = 0, \quad (\text{IV.13}')$$

$$\frac{\partial \delta \varrho_2}{\partial t} = \eta_1 \delta \varrho_e + \eta_E (\delta E + f_m e^{-i\omega t}) - \eta_2 \cdot \delta \varrho_2 \quad (\text{IV.14}')$$



ahol

$$\eta_1 = \left( \frac{\partial \Psi_l}{\partial \varrho_e} \right)_r; \quad \eta_E = \left( \frac{\partial \Psi_l}{\partial E} \right)_r; \quad \eta_2 = - \left( \frac{\partial \Psi_l}{\partial \varrho_2} \right)_r$$

és az  $r$ -index azt jelenti, hogy a deriváltakba a Riemann-megoldást kell beírni. A  $\delta \varrho_n$  (IV.12')-ben kifejezhető, mint  $\delta \varrho_e - \delta \varrho_2$ . A fenti egyenleteket a  $\delta E(0, t) = \delta E(L, t)$  határfeltétel mellett kell megoldani. Legyen

$$\delta \varrho_e = y_1(z) e^{-i\omega t}; \quad \delta E = y(z) e^{-i\omega t}; \quad \delta \varrho_2 = y_2(z) e^{-i\omega t}$$

akkor a következő egyenletrendszer adódik:

$$i\omega y_1 + u_0 y_1' + \frac{d}{dz} [\sigma_r v + D_n (y_1' - y_2') + v_{dr} (y_1 - y_2)] = 0 \quad (\text{IV.15a})$$

$$y' + \frac{4\pi}{\varepsilon} y_1 = 0 \quad (\text{IV.15b})$$

$$(i\omega - \eta_2) y_2 + u_0 y_2' + \eta_1 y_1 + \eta_E y = -\eta_E f_m. \quad (\text{IV.15c})$$

A fenti differenciálegyenlet-rendszerhez tartozó homogén egyenletrendszer az első ponthoz hasonlóan kezelhető. Az  $y(0) = y(L)$  határfeltételt figyelembe véve az aszimptotikus megoldás saját értékeire a következő adódik:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi i u_0}{L} - \frac{1}{L} \int_0^L (\eta_2 - \eta_1) dz \quad (\text{IV.16})$$

ahol  $|L| \gg 1$  pozitív vagy negatív egész szám. A megfelelő saját függvények közelítő alakja:

$$y_{1\lambda} = y_{2\lambda} = \text{const.} \exp \left\{ 2\pi i \lambda \frac{z}{L} - \int_0^z \frac{\eta_1 - \eta_2}{u_0} dz' + \frac{z}{L} \int_0^L (\eta_1 - \eta_2) dz \right\}$$

$$y_\lambda = -\frac{4\pi}{\varepsilon} \cdot L \frac{y_{1\lambda}}{2\pi i L}.$$

A (IV.14) egyenletből és az  $\eta_1, \eta_2$  definíciója alapján:

$$\eta_2 - \eta_1 = \frac{1}{\tau_g}; \quad \gamma \equiv \frac{1}{L} \int_0^L (\eta_2 - \eta_1) dz = \frac{1}{\tau_g} \quad (\text{IV.17})$$

Megjegyzem, hogy a számítás akkor is elvégezhető, ha  $\tau_g$ -ben figyelembe vesszük a gyenge térerősség-függést (v.ö. (II.5) egyenlet). Ekkor a fent definiált  $\gamma$  paraméterben a reciprokl generációs időnek a minta  $L$  hossza mentén vett átlaga szerepel.

A fenti eredmény úgy interpretálható, hogy a váltófeszültségű perturbáció hatására a stacioner doménben a térerősség és a koncentrációk az  $\omega_{rez} = \frac{2\pi}{T_0} |I|$  értékeknek megfelelően „modulálódnak”, ahol  $T_0 = L/|u_0|$  a domén áthaladás periódusa és a „rezonancia-szélességet” a  $\gamma$  paraméter határozza meg.



### IV. 3. A Gunn-domének modulálhatóságáról

A IV.1. pontban ismertetett elmélet több közelítést tartalmaz. Így, a diffúziós együttható függött ugyan a térerősségtől, de feltételeztük, hogy  $\eta=0$  és mint a II.1. pontban láttuk, ez más vonatkozásban lényeges egyszerűsítést jelentett. További egyszerűsítés a teljes minta elektromos semlegességére tett kikötés is. Bonch—Bruevich [IV.2] felvette azt a gondolatot, hogy esetleg magasabb közelítésben számolva felléphet a nem-lineáris oszcillációk elméletéből jól ismert jelenség a „parametrikus rezonancia”. A parametrikus rezonancia általános elméletével pl. a [II.27] és [II.28] monográfiák foglalkoznak részletesen.

Az ebben az irányban végzett vizsgálataim negatív eredménnyel zárultak és ezért máshol kellett keresni a Gunn-domének és a rekombinációs domének különböző viselkedésének okát.

Kiderült, hogy a lényeges pont a NDV kinetikájának figyelembevétele, melyet a Gunn-effektus esetén [IV.2]-ben elhanyagoltak. Könnyű belátni, hogy ha a rekombinációs instabilitás esetén a lokális egyensúlyból indulunk ki, vagyis a  $\Psi_1=0$  egyenletet használjuk, akkor semmiféle rezonancia tulajdonság nem adódik. A fenti észrevétel alapján a Gunn-effektus problémája, megváltoztatva a megváltoztatandókat, visszavezethető a rekombinációs instabilitás esetére. Valóban, az (I.9) egyenlet szerint a  $\Psi_1$  helyébe  $\Psi_{12}$  kerül:

$\Psi_{12} = \varrho_1/\tau_{12} - \varrho_2/\tau_{21}$ . Jelölje  $C_{12}^\circ$ ,  $C_{21}^\circ$  a megfelelő átmeneti valószínűségeket térerősség nélkül, akkor nyilván  $\tau_{12}^{-1} = C_{12}^\circ f(E)$ ;  $\tau_{21}^{-1} = C_{21}^\circ$  és a részleges egyensúly elve szerint:

$$\frac{C_{21}^\circ}{C_{12}^\circ} = \frac{\varrho_{10}}{\varrho_{20}} = \frac{N_1}{N_2} e^{\frac{\Delta}{kT}}$$

ahol  $N_1$ ,  $N_2$  a megfelelő állapotsűrűségek az „1” és „2” állapotokban,  $\Delta$ -ezen állapotok távolsága a vezetési sávban (GaAs esetén  $\Delta = 0,35$  eV).

Mivel a  $\tau$  szerepét a  $\tau_{21}$  veszi át, a (IV.16) sajátértékekre adódik:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi i |I|}{T_0} - \frac{1}{\tau_{21}}$$

és így csak a szereplő mennyiségek nagyságrendjében van különbség:  $\tau_{21} \approx 5 \cdot 10^{-12}$  sec és  $T_0 = 10^{-9}$  sec, ha  $|u_0| = 10^7$  cm/sec,  $L = 0,01$  cm.

A kvázi-egyensúly feltételezése, illetve a NDV kinetikájának explicit figyelembevétele nem csak a rezonancia-tulajdonságok szempontjából mutatkozott alapvetőnek. Mint a II. fejezetben kifejtett elmélet során bizonyítottam, a domén-mozgás is lényegesen függ attól, hogy a doménen belül, milyen az alacsony és nagy mozgékony-ságú állapotok közötti átmenetek sebessége a probléma más folyamatainak sebességéhez képest.

A domén-sebesség meghatározásánál is a kvázi-egyensúlytól (vagy lokális-egyensúlytól) való eltérés eredményezte a domén-alak-paraméterek megjelenését. Erre a körülményre gondoltam, amikor a fejezet elején azt állítottam, hogy a rezonancia-tulajdonságoknál felmerült probléma megoldása hozzásegített a domén-mozgás mélyebb megértéséhez.



## V. EGY ÚJ MODELL NEGATÍV DIFFERENCIÁLIS VEZETŐKÉPESSÉGŰ (NDV) ÁRAM-FESZÜLTSG KARAKTERISZTIKA LÉTREHOZÁSÁRA

Az I. fejezetben utaltam arra, hogy a domén-instabilitások fizikai hátterének megértése után rendkívüli mértékben megnőtt az érdeklődés a NDV-t biztosító modellek kutatása iránt.

Az I.1. Táblázatban a különböző rekombinációs centrumok térerősség-függő befogását, az I.2. Táblázatban felsorolt néhány félvezető anyag speciális sávszerkezetét használják fel a térerősség-függő effektív mozgékonyság előállítására, a NDV biztosítására.

Az I.1. Táblázat alapján, azoknál az anyagoknál, ahol a rekombinációs centrum egyáltalán azonosítható volt, mindig pont-hibákkal dolgoztak, kihasználva azt a tulajdonságukat, hogy a többlettöltésállapotú centrumok esetében a taszító potenciálon való elektron-befogás éppen megfelelő irányú térerőfüggést mutat: növekvő térerősséggel nő a befogási hatáskeresztmetszet. Mindezek a centrumok diszkrét töltésállapottal rendelkeznek és általában  $s=0, 1, 2$  és  $3$  értéket vehetnek fel. Felvetődött az a gondolat, hogy hasonló effektusok találhatók olyan rekombinációs centrumoknál is, ahol a töltésállapot „folytonosan” változhat: nevezetesen (él-) diszlokációknál. Az éldiszlokációk körül kialakuló makroszkópikus ( $\Phi$ ) potenciál-barrier jelent akadályt az elektron-befogásnál, és így várható, hogy a forró-elektronok könnyebben hatolnak át ezen a barrieren, mint a termikus elektronok. Ebben a fejezetben ezt a gondolatot követem végig, érvényesnek fogadva el a diszlokációkra vonatkozó néhány egyszerű modellt.

### V. 1. A rekombináció kinetikája diszlokációk esetében: a Glaenger-Jordán modell megjavítása

A diszlokációk szerepe a nem-egyensúlyi töltéshordozók élettartamának meghatározásában és a zajban már régóta ismert jelenség [V.1]—[V.6]. A kristálynövekedés során véletlenül keletkezett, vagy plasztikus deformációval mesterségesen létrehozott (él-) diszlokációk koncentrációja és az élettartam között számos szerző jól reprodukálható kapcsolatot talált [V.2], [V.6, 7]. A kísérleti eredmények analízise mutatta, hogy a diszlokációkon való rekombináció mechanizmusában a diszlokáció körül kialakuló potenciál-barriernek döntő szerepe van [V.1], [V.8, 9]. A potenciál-barrier hatása azonban nemcsak abban nyilvánul meg, hogy a részecske szám megváltozik a diszlokáció körül, hanem lényeges lehet magának a befogás mechanizmusának vizsgálatánál, pl. tunnelezés esetén, amint azt az [V.10, 11] és az újabb [V.12] dolgozatokban megmutatták. Természetesnek látszik az a kérdés, milyen lesz a forró-elektronok rekombinációja a negatívan töltött diszlokációkon és várható-e NDV fellépte.

A diszlokációk vizsgálata azért is érdekesnek látszik, mert számos esetben nem sikerült azonosítani az NDV-hez vezető centrumok természetét, ugyanakkor, amikor a diszlokációk létezése ezekben az anyagokban feltételezhető. Egy további körülmény, hogy a diszlokációk felületi rekombinációs centrumok szerepét is betölthetik [V.13] és így sávelhajlástól függően a felületi rekombináció is nem triviális módon változhat.



A diszlokációk — beleértve az „egyszerű” él-diszlokációkat is — egzaktul nehezen tárgyalható képződmények és az irodalomban számos modellt dolgoztak ki tárgyalásukra.

A jelen munkámban azt a modellt fogadom el, amely a diszlokációkat folytonos, töltött vonalaknak tételezi fel, amely körül a potenciál-eloszlást a Debye-hossz határozza meg [V.14]. Jóllehet a diszkrét centrumokból álló modell, vagy az egydimenziós sávmodell közelebb állhat a valósághoz [V.9], [V.15], illetve [V.14], a fenti feltételezés egyszerűbb matematikai leírást biztosít, ami új lehetőségek vizsgálata esetén igen lényeges. Ami a rekombináció kinetikáját illeti, jelen tárgyalás annyiban általánosabb az előzőeknél [V.1], [V.8], [V.11], hogy a rekombináció kinetikáját jellemző mindkét élettartamot meghatározom, tetszőleges diszlokáció sűrűség mellett. Az [V.1] és [V.8] dolgozatban vették következetesen figyelembe a diszlokáció körüli barrier hatását. Az újabb [V.16] munkában *Glaenger* és *Jordan* mutattak rá arra, hogy a befogódó elektronoknak nem csak a  $q\Phi$  energiával kell rendelkezniük, hanem azzal a többlet energiával is, amely a diszlokációkon már ülő elektronok újra-eloszlásához szükséges.

A fenti megfontolás alapján nem nehéz felírni a Shockley—Read—Hall modellnek megfelelő kinetikai egyenleteket. Valóban, ha  $N$  jelöli a diszlokációkkal kapcsolatos akceptor állapotok térfogati sűrűségét és  $n_b$ ,  $p_b$  a diszlokációk körüli potenciál-barrier csúcsán a vezetési, illetve vegyérték sávban az elektronok és lyukak koncentrációját, akkor a szokásos eljárással (lásd pl. [I.61] [I.65]) írhatjuk:

$$-\frac{dn}{dt} = NC_n[n_b(1-f) - n_1f] = U_n \quad (V.1)$$

$$-\frac{dp}{dt} NC_p[p_b f - p_1(1-f)] = U_p \quad (V.2)$$

Itt az  $f$  betöltési függvény mint ismeretes, nem adható meg a szokásos Fermi-Dirac eloszlás-függvény segítségével, mivel a diszlokáció számára feltételezett akceptor nívó (pl.  $n$ -típusú Ge, vagy Si-ra gondolunk), függ magától a betöltöttségtől, azaz  $E_2 + E^*(f)$  értéket kell írni;

$$f = \frac{1}{1 + \exp(E_2 - F_t + E^*)/kT} \quad (V.3)$$

ahol  $E_2$  a diszlokációk „valódi” akceptor nívója és  $t^*$  az elfogadott diszlokációs modelltől függ.  $F_t$  a diszlokáción ülő elektronok kvázi-Fermi nívója, mely csak egyensúlyban egyezik meg a vezetési elektronok, illetve lyukak Fermi-nívójával. Az [V.17]-ben *Read* mind a  $q\Phi$  potenciált, mind a diszlokációkon ülő elektronok elektrosztatikus energiáját figyelembe vette és így  $E^* = q\Phi \equiv E_0 f$ , ahol  $E_0$  a szomszédos akceptor állapotokban ülő elektronok elektrosztatikus energiája, mely a „dangling bond”-ok távolságával „ $a$ ” és az  $\epsilon$  dielektromos állandóval  $E_0 = q^2/\epsilon a$  alakban adható meg [V.17]. A  $q\Phi$  konkrét alakja pl.  $n$ -típusú anyagra [V.17]:

$$q\Phi = E_0 f [31 \ln(f/f_c) - 1,232] \quad (V.4)$$

ahol  $f_c = a[\pi(N_d - N_a)]^{1/3} \equiv a[\pi N_d^*]^{1/3}$  kifejezhető az ionizált donor és akceptor koncentrációk segítségével, azaz az  $N_d^*$  effektív donor-koncentrációval.



Az általánosság megszorítása nélkül feltételezhető, hogy  $n$ -típusú anyagról van szó, és így  $N_d^* > 0$ . Hasonló kifejezések írhatók fel  $p$ -típusú anyagra is.

Az (V.1), (V.2) egyenletekben szereplő  $n_b$ ,  $p_b$  mennyiségeket kifejezhetjük az  $n$ ,  $p$  és  $E^*$  segítségével, míg  $n_1$ ,  $p_1$  a részleges egyensúly elvéből, az  $U_n = 0$ ,  $U_p = 0$  feltételből határozható meg:

$$n_b = n \exp\left(-\frac{E^*}{kT}\right); \quad n_1 = n_{b0}(1-f_0) \cdot f_0^{-1} \quad (\text{V.5})$$

$$p_b = p \exp\left(+\frac{E^*}{kT}\right); \quad p_1 = p_{b0}f_0 \cdot (1-f_0)^{-1}$$

A rekombináció kinetikájának vizsgálatához még további összefüggés szükséges. Ez az elektromos semlegesség feltétele lehet, amely összekapcsolja az  $f$  betöltési függvényt a potenciál-barrier szélén levő  $n$ ,  $p$  koncentrációkkal. Mivel most a betöltött centrumok  $n_i$  koncentrációját az  $n_i = Nf$  kifejezés adja, írhatjuk:

$$n + Nf = p + N_d^* \quad (\text{V.6})$$

Az egyensúlyhoz közel az (V.1)–(V.2) egyenleteket linearizálni fogjuk, így a  $\delta n$ ,  $\delta p$ ,  $\delta f$  közötti összefüggésre lesz szükség, mely az (V.6) egyenlet alapján a következő alakú:

$$\delta n + N\delta f = \delta p. \quad (\text{V.7})$$

A linearizálásnál figyelembe kell venni, hogy az  $n_b$ ,  $p_b$  mennyiségekben az  $f$  is szerepel, az  $E^*$ -on keresztül.

Korábbi dolgozatomban [V.18], követve *Glaenger* és *Jordan* közelítését, ezt úgy végeztem el, hogy az  $E^*$ -ban szereplő logaritmikus tag változásától eltekintettem. Ez nem jelent lényeges eltérést, mivel azonban a számolás e feltételezés nélkül is minden további nélkül elvégezhető, a továbbiakban a logaritmikus tag változását is figyelembe veszem. Az  $E^*$  definíciója és az (V.4) kifejezés alapján:

$$E^* = E_0 f [31 \ln(f/f_c) - 0,232] \quad (\text{V.8})$$

ami egyensúlyban a következő értéket veszi fel:

$$\frac{E_0^*}{kT} = f_0 K_1; \quad K_1 = \frac{E_0}{kT} [31 \ln(f_0/f_c) - 0,232] \quad (\text{V.9})$$

Az  $E^*$  változását az (V.8) alapján kiszámíthatjuk és adódik:

$$\delta\left(\frac{E^*}{kT}\right) = K_2 \delta f; \quad K_2 = \frac{E_0}{kT} [31 \ln(f_0/f_c) + 2,768] \quad (\text{V.10})$$

A fentiek alapján a linearizálás elvégezhető. Valóban, bevezetve az  $x_1 = \delta n$ ;  $x_2 = \delta p$  jelöléseket, az  $x$  oszlopvektorra az alábbi differenciálegyenlet írható fel:

$$-\dot{x} = \begin{pmatrix} \alpha + \gamma_n & -\alpha \\ -\beta & \beta + \gamma_p \end{pmatrix} x \equiv Ax \quad (\text{V.11})$$



ahol az  $A$  matrix elemeiben szereplő mennyiségek a következő alakban írhatók fel:

$$\alpha = C_n n_{b0} [K_2(1-f_0) + f_0^{-1}]; \quad \beta = C_p p_{b0} [K_2 f_0 + (1-f_0)^{-1}];$$

$$\gamma_n = C_n N(1-f_0) \exp(-E_0^*/kT); \quad \gamma_p = C_p N f_0 \exp(+E_0^*/kT)$$

Az  $A$  mátrix spurját  $T(A)$ -val, determinánsát  $D(A)$ -val jelölve a rekombináció kinetikáját meghatározó karakterisztikus idők reciprokára írhatjuk:

$$\tau_{2/1}^{-1} = 2^{-1} [ + T(A) \mp \sqrt{T(A)^2 - 4D(A)} ].$$

Ha feltesszük, hogy  $4D(A) \cdot T(A)^{-2} \ll 1$ , akkor a közelítő gyökökre adódik:

$$\tau_1 \approx 1/T(A); \quad \tau_2 \approx T(A)/D(A), \text{ azaz}$$

$$\tau_1 = \frac{1}{\alpha + \beta + \gamma_n + \gamma_p}$$

$$\tau_2 = \frac{\alpha + \beta + \gamma_n + \gamma_p}{\alpha\gamma_p + \beta\gamma_n + \gamma_n \cdot \gamma_p}$$

A szereplő paraméterek értékét behelyettesítve — némi átrendezés után — a következő kifejezéseket lehet kapni:

$$\tau_1 = \frac{1}{\left( \frac{C_n n_{b0}}{f_0} + \frac{C_p p_{b0}}{1-f_0} \right) A_1 + \left[ C_p f_0 \exp\left(\frac{E_0^*}{kT}\right) + C_n(1-f_0) \exp\left(-\frac{E_0^*}{kT}\right) \right] N} \quad (\text{V.12})$$

$$\tau_2 = \frac{1}{\tau_1 C_n C_p N [A_1(n_0 + p_0) + N \cdot f_0(1-f_0)]} \quad (\text{V.13})$$

$$A_1 = 1 + K_2 \cdot f_0(1-f_0)$$

Ezzel megadtam a  $S-R-H$  modell élettartamának általánosítását diszlokációk esetére. A megfelelő  $S-R-H$  élettartamokat úgy kaphatjuk meg, hogy  $E_0 \equiv 0$ -t helyettesítünk, ami egyúttal  $K_2 = 0$  értéket ad és nyilván az  $n_b \rightarrow n$ ,  $p_b \rightarrow p$  helyettesítést írhatunk. A szokásos módon a hosszabb élettartamot lehet azonosítani a kísérleteknél megfigyelhető ún. stacioner élettartammal. Esetünkben ez  $\tau_2$ .

A fenti élettartam kifejezésekkel kapcsolatban néhány megjegyzést szükséges tenni. *Glaenger* és *Jordan* idézett dolgozatában az egyenletek linearizálása hibás ( $\gamma_n$  kimaradt az  $A$  mátrixból). Ennek következtében olyan élettartam kifejezéseket kaptunk, amelyek lényegesen különböznek a fenti (V.12), (V.13) formuláktól. Ebből adódott az a hibás megállapítása, hogy az élettartam diszlokációk esetén független a diszlokációk koncentrációjától. Ez ellentmond számos szerző jól reprodukált kísérleti eredményének [V. 2, 5, 19]. Pontosabban jó közelítéssel:

$$\tau_2 = \frac{1}{\sigma_r N_{d1}}, \quad (\text{V.14})$$

ahol  $N_{d1}$  a felület-egységre vonatkoztatott diszlokációsűrűség, amely az (V.1), (V.2) egyenletekben szereplő  $N$  akceptor állapot koncentrációjával az  $N = N_{d1}/a$  kapcsolat-



ban van, mígy  $\sigma_r$ , csak a hőmérséklettől függő  $\text{cm}^2\text{sec}^{-1}$  dimenziójú paraméter, melynek tipikus értéke pl. n-típusú Ge esetén, szobahőmérsékleten  $0,5 \text{ cm}^2\text{sec}^{-1}$  [V.19].

Ugyanakkor *Glaenger* és *Jordan* mérései eredményei valóban diszlokáció-sűrűségtől független élettartamot adtak. Az ellentmondás az (V.13) alapján egyszerűen feloldható. Kis  $N$  értékeknél  $\tau_2$  az (V.14) alakban írható, míg elég nagy diszlokáció-sűrűsége  $\tau_2$  elég széles tartományban független lesz  $N$ -től, egyezésben az [V.16] kísérleti megfigyeléssel. Ugyanakkor az (V.13) alapján várható a  $\tau_2(N)$ -nek egy újabb csökkenő szakasza, amikor a nevezőben az  $N^2$ -es tag dominál. Jelenleg nem ismerek ennek megfelelő kísérleti tény.

Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor  $\tau_2$  független  $N$ -től. Változatlanul n-típusú anyagot tekintve az (V.13) kifejezés az alábbi alakra egyszerűsödik [V.16]:

$$\tau_2 = \frac{f_0 \exp(E_0^*/kT)}{C_n n_0 [K_2 f_0 (1 - f_0) + 1]} \quad (\text{V.15})$$

vagy némi átalakítás után, felhasználva  $f_0$  és  $n_0$  konkrét alakját:

$$\tau_2 = \frac{(1 - f_0) \exp(-E_2/kT)}{C_n N_c [K_2 f_0 (1 - f_0) + 1]} \quad (\text{V.15}')$$

ahol  $N_c$  az állapot-sűrűség a vezetési sávban.

A fenti vagy az általános (V.13) kifejezések is mutatják, hogy az élettartam meghatározásához szükség van a szereplő mennyiségek termodinamikai egyensúlyban felvett értékeire, az  $n_0$ ,  $p_0$ ,  $f_0$  mennyiségekre is, azok hőmérséklet-függésére. A kérdést nem egyszerű megoldani, mert az  $f_0$  betöltési valószínűség nem csak az egyensúlyi Fermi-nívón keresztül függ  $f_0$ -tól. Nem elfajult félvezetőben az elektromos semlegesség egyenlete a következő alakra hozható  $n_0 - N f_0 = n_i^2/n_0 + N_d^*$ , ahol felhasználtam az  $n_0 p_0 = n_i^2$  összefüggést. Ez az egyenlet  $n_0$ -ra megoldható és ha az  $n_0 = N_c \cdot \exp(F_0/kT)$  összefüggést beírom, akkor a megoldandó egyenletrendszer:

$$f_0 = \frac{1}{1 + \exp \left\{ \frac{E_2 - F_0 + f_0 E_0 [3 \ln(f_0/f_c) - 0,232]}{kT} \right\}} \quad (\text{V.16})$$

$$\exp \left( \frac{F_0}{kT} \right) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{N_d^*}{N_c} \left( 1 - \frac{N}{N_d^*} f_0 \right) + \sqrt{\left( \frac{N_d^*}{N_c} \right)^2 \left( 1 - \frac{N}{N_d^*} f_0 \right)^2 + \frac{4n_i^2}{N_c^2}} \right\} \quad (\text{V.17})$$

Gyakran szükség van az  $n_0 - p_0$  mennyiség hőmérséklet-függésére. Az elektromos semlegesség egyenlete alapján  $n_0 - p_0 = N_d^* - N f_0$  és így  $f_0(T)$  ismeretében a keresett mennyiség hőmérséklet-függése is meghatározható. Az alábbiakban megmutatom, hogy az  $f_0(T)$  függvény, legalábbis extrinsic anyag esetében, igen jól közelíthető lineáris függvénnyel, valamely  $T_0$  hőmérséklet körül. Valóban, ha a vizsgált anyag pl. n-típusú, és ha a lyukak elhanyagolhatók az  $F_0$  Fermi-nívó meghatározásában, azaz

$$\exp(F_0/kT) = \frac{N_d^*}{N_c} \left( 1 - \frac{N}{N_d^*} f_0 \right) \quad (\text{V.18})$$



akkor az  $f_0(T)$  függvény jó közelítésben

$$f_0(T) = f_0(T_0) + \left( \frac{\partial f_0}{\partial T} \right)_{T_0} (T - T_0) \quad (\text{V.19})$$

alakban írható, ahol a  $\frac{\partial f_0}{\partial T}$  értékét az (V.16) alapján az (V.18) felhasználásával határozhatjuk meg. Némi számolás után adódik:

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = - \frac{f_0(1-f_0)}{T} \frac{\ln \frac{N_c}{N_d^*} + \frac{3}{2} - \ln \left[ \left( 1 - \frac{N}{N_d^*} f_0 \right) \cdot f_0^{-1} \cdot (1-f_0) \right]}{1 + f_0(1-f_0) [K_2 + N \cdot (N_d^* - N f_0)^{-1}]} \quad (\text{V.20})$$

A szereplő mennyiségek nagyságrendjét vizsgálva belátható, hogy gyakran elegendő a következő közelítés:

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} \approx - \frac{k \ln(N_c/N_d^*)}{E_0 [3 \ln(f_0/f_c) + 2,768]}, \quad (\text{V.21})$$

ami valóban érzéketlen a hőmérséklet változására, mivel a logaritmikus változások a szokásos értékek mellett kicsinyek.

Ez egyúttal igazolja a lineáris közelítés helyességét. Érdemes megjegyezni, hogy az (V.20) kifejezés alapján — egyébként azonos feltételek mellett — az  $f_0$  hőmérséklet-függése növekvő diszlokáció-sűrűségnél gyengébb lesz. Erre a kérdésre még röviden visszatérek, amikor majd a tényleges numerikus számításokat a VI.3 pontban ismertetem.

Az (V.15) egyenlet alapján megállapítható, hogy milyen lehetőség van a forró-elektronok vizsgálatára. Azonnal látható, hogy két lehetőség áll rendelkezésre. Az egyiknél a  $C_n$  befogási paraméter függ explicite az  $E$  külső tértől (annak négyzetétől), a második esetben egyszerűen a töltéshordozók effektív hőmérsékletét kell beírni  $T$  helyébe. Az alábbiakban mindkét esetet megvizsgálom és a várható effektus nagyságára becsléseket végzek.

## V. 2. Forró-elektronok befogása diszlokációkon

A határozottság kedvéért a továbbiakban is mindenütt elektronok befogását tárgyalom  $n$ -típusú anyagban levő negatívan töltött diszlokációkon. A számításokat lyukakra nézve hasonlóan lehet elvégezni.

Az elektronok diszlokációkon történő befogását a tunnelezés lehetőségének explicit figyelembevételével *Gulyaev* vizsgálta [V.11]. Megmutatta, hogy a potenciál barrier-alakjának explicit hőmérséklet-függése a befogás bonyolult hőmérséklet-függéséhez vezet. Mind az általa adott becslések, mind *Figielski* vizsgálatai [V.9] azt mutatják, hogy a tunnelezés Ge esetén 180 K alatt dominálhat. A tunnelezés szerepének további kísérleti alátámasztását Schröter adta meg nemrég megjelent munkájában [V.12].

Tegyük fel, hogy a minta hossz tengelyére ( $x$ -tengely) merőlegesen, a  $z$ -tengely irányában éldiszlokációk vannak. Az  $xy$  síkban a diszlokáció körüli potenciál-



barrierre a következő kifejezés írható fel [V.14]:

$$U(r) = \frac{\alpha_0}{q} K_0(r/L_D) \quad (\text{V.22})$$

ahol

$$\alpha_0 = \frac{2fq^2}{\varepsilon a}; \quad \alpha_D = \left( \frac{\varepsilon kT}{4\pi nq^2} \right)^{1/2} \quad (\text{V.23})$$

Az  $L_D$  Debye-hosszban szereplő  $n$  jelöli az árnyékoló elektronok koncentrációját.  $K_0(x)$ , a másodfajú módosított Bessel-függvény. Az (V.22) potenciált feltételezve [V.11]-ben meghatározták a tunnelezési valószínűséget WKB közelítésben, és annak segítségével a diszlokációkon való befogás együtthatóját a következő alakban adták meg:

$$B = \int_0^\infty v_\perp l(v_\perp) f(v_\perp) dv_\perp, \quad (\text{V.24})$$

ahol  $f(v_\perp)$  a diszlokáció tengelyére merőleges síkban az eloszlás-függvény,  $l(v_\perp)$  a befogást jellemző befogási rádiusz, mely a tunnelezési faktor figyelembevételével a következő alakú:

$$l(v_\perp) = v_\perp^{\mu-2} \Psi_1(v_\perp) e^{-2ge^{-\gamma v}}; \quad v_{\perp 1} < v < v_{\perp 2} \\ l(v_\perp) = 0; \quad v_\perp < v_1; \quad v_\perp > v_2 \quad (\text{V.25})$$

ahol  $y = \frac{m^* v^2}{2kT}$ ;  $\gamma = kT/\alpha_0$ ;  $\Psi_1(v_\perp)$  lassan változó függvény,  $\mu$ -egységnyi nagyságrendű állandó,  $v_{\perp 1}$ ,  $v_{\perp 2}$  a megmaradási tételek által előírt sebességértékek. A továbbiakban követem [V.11]-et, és így az egyszerűség kedvéért felteszem, hogy  $v_{\perp 1} = 0$ ;  $v_{\perp 2} = \infty$ . A tunnelezés  $g$  paramétere függ a potenciál kiterjedésére jellemző  $L_D$  Debye-hossztól és a potenciál erősségére jellemző  $\alpha_0$  paramétértől:

$$g = L_D \left( \frac{2m^* \alpha_0}{h^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{V.26})$$

Az (V.24) egyenlet mutatja, hogy a forró-elektronok vizsgálatához az egyensúlyi eloszlásfüggvény helyett a nagy térnél érvényes *normált* eloszlásfüggvényt kell ismerni.

#### (i) Akusztikus fononokon való szóródás

Ismeretes, hogy ha az akusztikus fononokon való szóródás dominál, és a külső elektromos tér nem túl nagy, akkor a forró-elektronok eloszlásfüggvényét az ún. Davidov-féle eloszlásfüggvény adja meg (lásd pl. [V.20] 227. oldal). Izotrop effektív tömeg esetén a  $W = m^* v^2/2$  jelölés mellett írhatjuk:

$$f(W) = N_0 \left[ 1 + \frac{W}{kT\alpha} \right]^{\alpha} \exp(-W/kT) \quad (\text{V.27})$$

ahol  $\alpha = \frac{3\pi}{16} \left( \frac{\mu_l E}{c_s} \right)^2$  és  $\mu_l$  az akusztikus fononokon való szórásnak megfelelő moz-



gékonyság kis térnél,  $c_s$  — a hangsebesség. Az  $N_0$  normálási tényezőt az alábbi kifejezés adja [V.21]:

$$N_0 = (2\pi)^{-1} (2m^* kT)^{3/2} J^{-1}(\alpha) \quad (\text{V.28})$$

$$J(\alpha) = \alpha^{-\alpha} \int_0^{\infty} x^{1/2} (x+\alpha)^{\alpha} e^{-x} dx = \Gamma(3/2) \cdot \alpha^{\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{2}} \exp(\alpha/2) \cdot W_{\lambda, \lambda'}(\alpha)$$

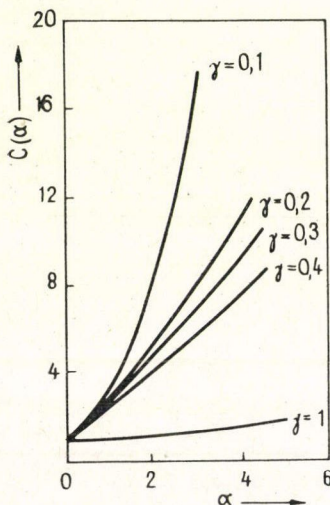
ahol  $W_{\lambda, \lambda'}(\alpha)$  a  $\lambda = \alpha/2 - 1/4$ ;  $\lambda' = \alpha/2 + 3/4$  indexű Whittaker-féle függvény,  $\Gamma(x)$  az Euler-féle Gamma-függvény. Most az  $xy$  síkban normált eloszlásfüggvény érdekese, amelyre polárkoordinátákban ( $p = m^* v_{\perp}$  jelöléssel):

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} f(p, \varphi) p dp d\varphi = 1 \quad (\text{V.29})$$

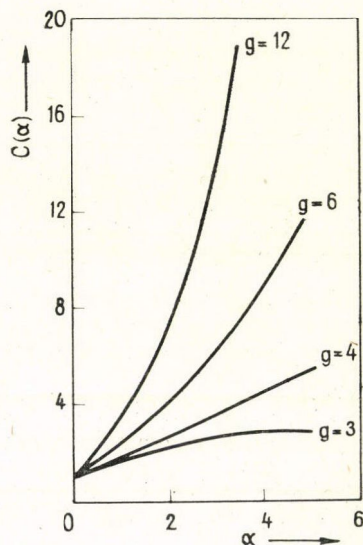
Az (V.27) egyenletből kiindulva, némi számolás után kapjuk:\*

$$f(p, \varphi) = (2\pi m^* kT)^{-1} A(\alpha) \cdot (y+\alpha)^{\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{4}} \cdot \exp(-y/2) \cdot W_{\kappa, \kappa}(y+\alpha) \quad (\text{V.30})$$

ahol  $W_{\kappa, \kappa}$  ismét a Whittaker-féle függvény  $\kappa = \alpha/2 + 1/4$  indexnél.



V. 1. ábra. A befogási paraméter relatív változása az  $\alpha \sim E^2$  függvényében.  $v=0,5$ ;  $g=12$ .  $\gamma$  értéke változik.



V. 2. ábra. A befogási paraméter relatív változása az  $\alpha \sim E^2$  függvényében.  $v=0,5$ ;  $\gamma=0,1$ .  $g$  értéke változik.

\* A számításnál felhasználtam a következő összefüggést (V.22 333. oldal):

$$\int_0^{\infty} x^{-1/2} (x+y+\alpha)^{\alpha} e^{-x} dx = (y+\alpha)^{\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{4}} \cdot \exp\left(\frac{y+\alpha}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) W_{\kappa, \kappa}(y+\alpha),$$

ahol  $\kappa = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{4}$ .



Az  $y = p^2/2m^*kT$  változót a dimenziótlán „tranzverzális energia” jelölésére veztettem be, és

$$A(\alpha) = \alpha^{-\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{4}} \cdot W^{-1}_{\lambda'}(\alpha).$$

A külső tér hatásának jellemzésére meghatározzuk a  $B$  paraméter változását jellemző  $C(\alpha) \equiv B(\alpha)/B(\alpha=0)$  hányadost. Mindenütt bevezetve az  $y$  dimenziótlán változót, és a  $(\mu-1)/2 = \nu$  jelölést, kapjuk:

$$C(\alpha) = \frac{A(\alpha) \int_0^\infty y^\nu e^{-y-2ge^{-\gamma y}} (y+\alpha)^{\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{4}} \cdot W_{\kappa, \kappa}(y+\alpha) dy}{\int_0^\infty y^\nu \cdot e^{-y-2ge^{-\gamma y}} dy} \quad (V.31)$$

Az (V.31) kifejezés vizsgálatát megnehezíti a számláló integráljában fellépő  $W_{\kappa, \kappa}$  függvény. Most az [V.11]-ben alkalmazott „steepest descent” módszer sem látszik célravezetőnek analitikus vizsgálat céljából. Így a várható effektus illusztrálására a szereplő paraméterek néhány értéke mellett az integrálást numerikusan végeztem el. Az V. 1. ábrán  $\nu=0,5$  és  $g=12$  paraméterek mellett a  $\gamma$  értékét változtattam, mely fizikailag a termikus energia és a potenciál erősségének viszonyát jellemzi. A görbeseregéből azonnal leolvasható, hogy alacsony hőmérsékleten, vagy nagy abszolút értékű töltések esetén, a  $C(\alpha)$  már relatíve kis értékeknél is jelentősen változik; nő, azaz a forró elektronok élettartamának csökkenni kell.

A  $\gamma$  mellett a  $g$  paraméter az, amit függetlenül lehet változtatni. A potenciál alakjára jellemző  $g$  különböző értéke mellett, rögzített  $\gamma$  értéknél az V. 2. ábra mutatja a  $C(\alpha)$  változását.

## (ii) Ionizált szennyezőkön való szórás

Alacsony hőmérsékleten, elég nagy szennyező koncentráció mellett, a fononokon való szóráson kívül a töltéssel rendelkező ionizált szennyezőkön való szórást is figyelembe kell venni. Esetünkben maguk a diszlokációk játszhatják a töltött szennyezők szerepét, mert mint ismeretes, a diszlokációs mintákban a mozgékony-ság jelentősen csökkenhet [V.23]. Most anélkül, hogy a szóró centrum jellegét specifikálnánk, az [V.24] [V.25] dolgozatok alapján felírhatjuk a forró-elektronok közelítő eloszlásfüggvényét.

Jelölje ismét  $W$  az elektronok energiáját az izotrop sávban, akkor:

$$f(W)N'_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2}\alpha' \cdot \left( \frac{W}{kT} \right)^2 + 0 \left[ \alpha'^2 \left( \frac{W}{kT} \right)^4 \right] \right\} \exp \left( -\frac{W}{kT} \right) \quad (V.32)$$

ahol  $N'_0$ -normálási állandó,  $\alpha' = \frac{3\pi}{16} \left( \frac{\mu^* E}{c_s} \right)^2$  a külső teret jellemző dimenziótlán paraméter, melyben a  $\mu^*$  effektív mozgékony-ságra írhatjuk:  $\mu^* = \left( \frac{1}{6} \mu_l \cdot \mu_i \right)^{1/2}$ , ahol  $\mu_l$ ,  $\mu_i$  a kis elektromos térnél a rácsrezgésektől, illetve szennyeződésektől eredő mozgékony-ság. Az (V.32) kifejezés akkor érvényes, ha  $6\mu_l/\mu_i \ll 1$  és  $\alpha'(W/kT)^2 \ll$



$\ll 1$ . Az  $f(W)$  normálása könnyen elvégezhető és adódik:  $N'_0 = (1 + (15/8) \cdot \alpha')^{-1}$ . Most ismét a diszlokációkra merőleges síkban kell a normált eloszlásfüggvényt meghatározni. Az előzőekhez hasonló számítás alapján, bevezetve ismét a dimenziótlan  $y = m^* v_\perp^2 / 2kT = p^2 / 2m^* kT$  változót:

$$f(p, \varphi) = N'_\perp \left[ 1 + \frac{\alpha'}{2} (y^2 + y + 3/4) \right] e^{-y} \quad (V.33)$$

ahol a normálási tényezőre adódik:

$$N'_\perp = (2\pi m^* kT)^{-1} \cdot \left( 1 + \frac{15}{8} \alpha' \right)^{-1}$$

A befogási paraméter, illetve annak váltakozása az (V.33) eloszlásfüggvény mellett egyszerűen felírható:

$$C(\alpha') = \left( 1 + K \frac{\alpha'}{2} \right) \cdot \left( 1 + \frac{15}{8} \alpha' \right)^{-1} \quad (V.34)$$

ahol az  $\alpha'$ -tól független  $K$  definíciója:

$$K = \frac{\int_0^\infty y^v (y^2 + y + 3/4) e^{-y - 2ge^{-\gamma y}} dy}{\int_0^\infty y^v e^{-y - 2ge^{-\gamma y}} dy} = \frac{I_1}{I_0}. \quad (V.35)$$

V. 1. TÁBLÁZAT

$\frac{\gamma=0,1}{\gamma=0,5}$	$I_0$	$K$	$\frac{\gamma=0,1}{\gamma=0,5}$	$I_0$	$K$
g			g		
1,5	$6,9 \times 10^{-2}$	8,7	6,5	$4,1 \times 10^{-5}$	38,8
2,0	$3,0 \times 10^{-2}$	10,0	7,0	$2,4 \times 10^{-5}$	44,4
2,5	$1,3 \times 10^{-2}$	11,6	7,5	$1,2 \times 10^{-5}$	50,6
3,0	$6,0 \times 10^{-3}$	13,4	8,0	$7,1 \times 10^{-6}$	57,1
3,5	$2,8 \times 10^{-3}$	15,6	8,5	$4,1 \times 10^{-6}$	64,1
4,0	$1,3 \times 10^{-3}$	18,2	9,0	$2,5 \times 10^{-6}$	71,3
4,5	$6,2 \times 10^{-4}$	21,3	9,5	$1,5 \times 10^{-6}$	78,8
5,0	$3,0 \times 10^{-4}$	24,9	10,0	$9,4 \times 10^{-7}$	86,4
5,5	$1,5 \times 10^{-4}$	29,0	10,5	$6,0 \times 10^{-7}$	94,2
6,0	$7,9 \times 10^{-5}$	33,6	11,0	$3,9 \times 10^{-7}$	102,1
—	—	—	12,0	$1,7 \times 10^{-7}$	118,1



A várható változás nagyságrendjének meghatározására a  $K$  értékét kiszámoltam a szereplő paraméterek néhány értéke mellett. Az V.1. Táblázatban tüntettem fel a kapott eredményeket, az (V.35) egyenlet nevezőjében szereplő  $I_0$  integrállal együtt. Ez utóbbira a NDV lehetőségének vizsgálatánál lesz szükség.

(iii) *Optikai fononokon való szórás*

Mint említettem, egyszerű a számolás, ha be lehet vezetni a forró-elektronok effektív hőmérsékletét. Fizikailag világos, hogy ez a helyzet, ha pl. az elektron-optikai fonon kölcsönhatás dominál (magas hőmérséklet, nagy külső elektromos terek), vagy nagy elektron koncentrációknál, amikor az elektron-elektron kölcsönhatás állítja be az elektrongáznak a rácsnál magasabb hőmérsékletét [V.20], [V.26]. Az optikai és akusztikus fononokon való kombinált szórás esetén, ha az optikai fononokkal való kölcsönhatás dominál, egyszerű sávszerkezetet feltételezve, az alábbi kifejezést lehet levezetni az elektronok  $T_e$  effektív hőmérsékletére (lásd [V.20], 233. oldal):

$$kT_e = q^2 1_{ae;op} \cdot 1_{op} (3\hbar\omega_0)^{-1} (m^*/m_0) E^2 + F(x_0) \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

ahol  $1_{ae;op}$  az akusztikus és optikai fononokon való kombinált szórás szabad úthossza,  $\hbar\omega_0$  az optikai fononok energiája,  $x_0 = \hbar\omega_0/kT$ ,  $F(x_0) = (e^{x_0} + 1) \cdot (e^{x_0} - 1)^{-1}$ . Figyelembe véve, hogy [V.20]:

$$1_{ae;op} = 1_{ae} \left[ 1 + \frac{1_{ae}}{1_{op}} F(x_0) \right]$$

valamint, hogy a fenti egyszerű sávmodellben  $\frac{1_{ae}}{1_{op}} = \frac{x_0 b}{2}$ , ahol  $b = E_{1op}^2/E_1^2$  az optikai és akusztikus fononokkal való kölcsönhatás deformációs potenciáljának négyzetéből képezhető mennyiség, írhatjuk:

$$kT_e = F(x_0) \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{q^2 1_{op}^2 b (m^*/m_0)}{6 kT \left[ 1 + \frac{x_0 b}{2} F(x_0) \right]} \cdot E^2. \quad (V.36)$$

Az (V.36) egyenlet használatánál ügyelni kell arra, hogy természetesen nem lehet tetszőleges nagy térerősséget beírni  $E$  helyébe, mivel nincs az (V.36) levezetésénél figyelembe véve, hogy igen nagy elektron-energiáknál a völgyek közötti szórás is szerepet játszik. Más szóval az elektron-gáz valójában nem képes olyan magas hőmérsékletre felmelegedni, mint az (V.36)-ból adódnak. Az [V.27] dolgozat számításai alapján bátran használható a fenti kifejezés  $kT_e \approx 2 - 3\hbar\omega_0$  értékig. Ge esetén (V.36) mintegy 5kV/cm térerősségig jó leírást ad, szobahőmérséklet környékén. A szereplő paraméterek értékei Ge esetében:  $\hbar\omega_0 = 0,037$  eV;  $m^*/m_0 = 0,3$ ;  $b = 0,4$ ;  $l_{op} = 83$  Å.

### V. 3. Forró-elektronok szóródása diszlokációkon

Ahhoz, hogy a fejezet elején kitűzött célt következetesen végig lehessen vinni, vagyis a NDV lehetőségét vizsgáljam, tisztázni kell a mozgékonyság térerősség függését is. Valóban, a  $\sigma(E) = qn(E) \cdot \mu(E)$  miatt előállhat az az eset, hogy az  $n$  csökken növekvő térerősséggel, ami a NDV szempontjából előnyös, ugyanakkor



a mozgékonyosság nő, ami leronthatja ezt a hatást. Az előző pontban vizsgált (i), (ii) esetben vizsgáljuk meg a mozgékonyosság térfüggését. Az eredő mozgékonyaságról tételezzük fel, hogy az akusztikus fononokon való szóródás ( $\mu_l$ ), a ponthibákön ( $\mu_i$ ) és a diszlokációkon való szóródás ( $\mu_d$ ) eredményeként jön létre. Ismeretes, ha a szóródási mechanizmusok függetlenek, akkor az eredő mozgékonyosság  $\mu$ :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_l} + \frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_d} \quad (\text{V.37})$$

Azonnal belátható, hogy elegendő a  $\mu_d$  térfüggésével foglalkozni. Valóban, ismeretes, hogy a  $\mu_l$  növekvő térrel csökken (pl. [V.20]), ezért ha  $\mu_d$  növekvő térrel nő, akkor ez csak addig tart, amíg az eredő mozgékonyosság el nem éri az adott hőmérsékleten az adott térhez tartozó  $\mu_l(E)$  értéket. A továbbiakban úgy tekinthető a probléma, hogy az ionizált szennyezőkön való szórás  $\mu_i$  mozgékonyosság érték helyébe, ha szükséges, a  $\mu_d$  mozgékonyaságot helyettesítjük, vagy az  $\frac{1}{\mu_{id}} = \frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_d}$  értéket. Az

[V.23] dolgozatban vizsgálták kis elektromos tereknél a  $\mu_d$  értékét abban az esetben, ha a diszlokáció körüli potenciál az (V.22) formulával írható le. A kísérletekkel való összehasonlítás alapján Pődör megmutatta, hogy ez jelentős járulék a  $\mu$  meghatározásában alacsony hőmérsékleten, már 200 K-tól kezdve.

A diszlokációkra merőleges irányban kapcsolva a  $E$  teret és feltételezve egy pillanatra, hogy az elektronok koncentrációjának még nem volt ideje a térrel változni, a forróelektronok esetére az alábbi alakban írható fel a  $\mu_d(\alpha)$  mozgékonyosság:

$$\mu_d(\alpha) = \frac{q}{kT} \cdot \frac{\int \tau_d(v_{\perp}) v_{\perp}^2 f(v, \alpha) d^3v}{\int f(v, \alpha) d^3v}, \quad (\text{V.38})$$

ahol [V.23]-nak megfelelően:

$$\tau_d(v_{\perp}) = \frac{8 \varepsilon^2 a^2 m^{*2} (h^2/4m^{*2} \cdot L_D^2 + v_{\perp}^2)^{3/2}}{(4\pi)^2 N_{dl} q^4 f^2 L_D}$$

A tényleges számításoknál a számlálóban levő első tag elhanyagolható a  $v_{\perp}^2$  mellett.

A fenti (V.38) kifejezés tehát azt írja elő, hogy az (V.27), illetve az (V.32) eloszlásfüggvénnyel kell az integrálásokat elvégezni. A szögváltozók szerinti integrálások elvégzése után, a Davidov-féle eloszlásfüggvény esetén a következő kifejezés adódik:

$$\mu_d(\alpha) = R(\alpha) \cdot \mu_d \quad (\text{V.39a})$$

ahol

$$\mu_d = \frac{15 \varepsilon^2 a^2 (kT)^{3/2}}{2(2\pi)^{3/2} N_{dl} q^3 f^2 L_D m^{*1/2}} \quad (\text{V.39b})$$

az [V.23]-ban levezetett és kis térnél érvényes mozgékonyosság kifejezés, míg az  $R(\alpha)$  függvény csak az  $\alpha$  változó függvénye:

$$R(\alpha) = \Gamma(3/2) \cdot \Gamma_{(4)}^{-1} J_3(\alpha) J_{1/2}^{-1}(\alpha) \quad (\text{V.40})$$

ahol  $J_k(\alpha) = \int_0^{\infty} x^k (1+x/\alpha)^{\alpha} e^{-x} dx$ . A  $J_k(\alpha)$  integrálokat is ki lehet fejezni a Whittaker-



féle függvények segítségével. Érdemes felírni  $R(\alpha)$  aszimptotikus kifejezéseit. Könynyű belátni, hogy  $\alpha \ll 1$  esetén:

$$R(\alpha) \approx \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(4)} \cdot \frac{\Gamma(4+\alpha)}{\Gamma(3/2+\alpha)}$$

míg  $\alpha \gg 1$  esetre a következő kifejezés érvényes:

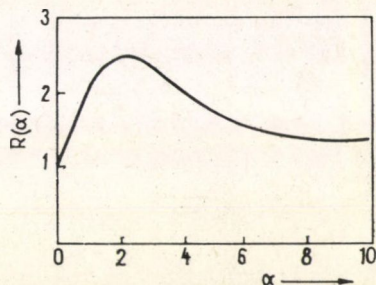
$$R(\alpha) \approx \frac{\Gamma(3/2) 2^{5/4}}{\Gamma(4) \cdot \Gamma(3/4)} \alpha^{5/4}.$$

Az  $R(\alpha)$  függvényt, azaz a  $\mu_d(\alpha) \cdot \mu_d^{-1}$  hányadost az V.3. ábrán mutatom be, az  $0 < \alpha < 10$  tartományban. Látható, hogy az  $\alpha$  lényeges tartományában  $R(\alpha)$  nem változik jelentősen, sőt  $\alpha = 2$  körül csökkenő szakaszt is mutat. Ennek közvetlen, szemléletes fizikai magyarázatát pillanatnyilag nem látom.

Az *ionizált szennyezőkön való szórás* esetén egyszerűbb a számolás. Az elemi integrálás elvégzése után adódik:

$$\mu_d(\alpha') = \mu_d \frac{1 + 10\alpha'}{1 + \frac{15}{8}\alpha'} \equiv r(\alpha) \cdot \mu_d$$

(V.41)



V. 3. ábra. A  $\mu_d(\alpha)$  mozgékonyosság relatív változása az (V. 40) formula alapján.

ahol most vigyázni kell arra, hogy az  $\alpha'$ -ben szereplő  $\mu_i$ -t azonosítottuk  $\mu_d$ -vel, vagy  $\mu_{id}$ -vel, ha még a ponthibák is szerepet játszanak az elektronok szóródásában.

#### V. 4. A NDV lehetőségének vizsgálata

Az előzőek alapján már megvizsgálhatjuk a NDV felléptének lehetőségét. Részletesebben a (ii) esetet vizsgálom, mivel erre az esetre könnyebben áttekinthető formulák adódtak. Hasonló megfontolások érvényesek az (i) esetre is. Tegyük fel, hogy a vizsgált mintában a betöltött és üres diszlokációk koncentrációja nagyobb a vezetési elektronok koncentrációjánál, azaz  $n < Nf_0$ ,  $N(1-f_0)$  és így  $n$  változása nem jelent lényeges változást az  $Nf_0$ ,  $N(1-f_0)$  egyensúlyi értékekhez képest. Az áram-sűrűséget  $j(E) \approx \sigma(0, \alpha')$ ,  $C^{-1}(\alpha')E$  alakban lehet felírni, ahol  $\sigma(0)$  a zérus térerősségnél mérhető vezetőképesség. Ebben a kifejezésben elhanyagoltam azt a tényt, hogy  $\mu_d$  is függ  $n$ -től, éspedig (V.39b) szerint ez  $\sqrt{n}$ -es függést ad. Ennek figyelembevételével:  $j(E) = \sigma(0) r(\alpha') C^{-\frac{3}{2}}(\alpha') E$ . Sajnos van egy másik effektus is, amit figyelembe kell venni: az  $n$  csökkenésével a „g” tunnelezési paraméter nő, ami a töltéshordozók ellentétes irányú változásához, azaz növekedéséhez vezet. Az ellentétes irányon a NDV szempontjából kedvezőtlen irányt értem. Ez a hatás jellemezhető az  $I_0(g, \gamma, v)$  integrállal, amely az (V.35) nevezőjében lép fel. Feltételezve, hogy  $\gamma$ ,



v változatlanok, írható:

$$j(E) = \sigma(0) \cdot r(\alpha') \cdot C^{-3/2}(\alpha') \left[ \frac{I_0(g)}{I_0(g_0)} \right]^{3/2} \cdot E \quad (\text{V.42})$$

A tényleges számításnál kis  $\alpha'$  változásoknál meg kell határozni a  $C(\alpha')$ -ket, majd az ahhoz tartozó  $g(n)$ -ket és így felépíteni a karakterisztikát.\* E helyett a következőképpen járhatunk el. Az  $I_0(g) \cdot I_0(g_0)$  faktor nélkül meghatározzuk, hol lépne fel a NDV és megnézzük, az így kiszámított  $\alpha_{\max}$ -hoz milyen  $n(\alpha_{\max})$ , azaz  $g(n/\alpha_{\max})$  tartozik.

A  $j(E)$ -ben az  $E$  helyébe  $\sqrt{\alpha'}$ -t bevezetve a  $J(\alpha') = (1 + a\alpha')(1 + b\alpha')^{\frac{1}{2}} \cdot (1 + c\alpha')^{-\frac{3}{2}} \sqrt{\alpha'}$  függvényt kell vizsgálni, ahol  $a=10$ ,  $b=15/8$ ,  $c=K/2$ . A fenti függvény szélső értéke  $\alpha'_{\max} \approx 1/(2c - 3a - 2b)$  értéknél van. Ha  $K=60$ , akkor  $\alpha'_{\max} \approx 0,038$ , ami  $C(\alpha'_{\max}) \approx \approx 2$  értéket ad. Könnyű belátni, hogy a fenti  $C(\alpha'_{\max})$ -nak megfelelő  $\sqrt{2}$ -szeres  $g$  változás miatt fellépő  $I_0(g_0 \sqrt{2})/I_0(g_0)$  faktor az V.2. ábra, valamint az V.1. Táblázat alapján  $\approx (0,14)^{\frac{3}{2}}$ .

Mindezek alapján az a következtetés vonható le, hogy a (ii) esetben NDV nem valószínűsíthető meg.

Teljesen hasonló számítás érvényes a (i) esetben is, azzal a különbséggel, hogy a mozgékonyosság nem függ explicite az  $n$ -től. Mint láttuk, növekvő térrel a befogás nő, és így  $n$  csökkenni fog ismét, azonban ez a változás lassú a NDV fellépéséhez.

Ponthibák esetén is hasonló következtetéshez jutottak [V.25]-ben. Itt jegyzem meg, hogy a (ii) esetben a mozgékonyosság térfüggésének figyelembevétele lényeges, mivel az (V.34) egyenlet szerint a befogás nem exponenciálisan függ az  $\alpha'$ -től, mint az (i) esetben. Az [V.25] dolgozatban a mozgékonyosság lehetséges növekedését ebben az esetben is elhanyagolták, ami az  $\alpha'_{\max}$  értékét lényegesen növeli.

Végezetül vizsgálom a (iii) esetet. Tegyük fel, hogy az  $n$ -típusú mintában olyan az  $N_{dl}$  diszlokáció koncentráció, hogy  $n_0 < f_0 N$  továbbá elég magas a hőmérséklet, úgy, hogy a mozgékonyosság meghatározásánál  $\mu \approx \mu_l < \mu_d$ . Ha a külső tér nagy és (V.36) érvényes, akkor az elektronok egy  $T_e$  hőmérsékletű Boltzmann-gáznak tekinthetők és az élettartam az (V.15)-ből  $T \rightarrow T_e$  helyettesítéssel kapható.

A Ge-nál szokásos paraméterek alapján számolt  $T_e$  jelentősen nagyobb lehet a  $T$  rácshőmérsékletnél, s ha a  $\tau_2$ -re az (V.15) kifejezés érvényes,  $\tau_2$  növekvő térrel csökkenni fog.

Az NDV most úgy valószínűsíthető meg, hogy az erősen kompenzált mintát olyan fénnel világítjuk meg, hogy az elektronok a diszlokációkról kerüljenek a vezetési sávba. Ha megfelelő nagy teret alkalmazunk, akkor ebben a fotovezetésben észlelni lehet a NDV-t a  $\tau_2$  élettartam, valamint a mozgékonyosság csökkenése miatt.

Mielőtt e fejezetet lezárnám, érdemes kissé részletesebben szólni a kísérleti lehetőségekről. Az előzőek talán túlságosan pesszimistikus becslései alapján úgy tűnhet, hogy a forró-elektronok rekombinációja és szóródása diszlokációkon kísérletileg igen nehezen követhető kutatási terület. Először vizsgáljuk a mozgékony-

\* A becsléseknél hasznos a  $g$ ,  $\gamma$ ,  $L_D$  stb. mennyiségeket az alábbi alakban felírni ( $Ge$ ,  $a=4\text{\AA}$ ):  $g=2,1 \cdot 10^9 (fn)^{1/2} (T/300)^{1/2}$ ;  $\gamma=0,73 (T/300) \cdot f^{-1}$ ;  $L_D=4,8 \cdot 10^2 (T/300n)^{1/2} \text{ cm}$ ;  $\mu=3,8 \cdot 10^3 (300/T)^{3/2} \text{ cm}^2/\text{V sec}$ ;  $\mu_d=3 \cdot 10^6 (T/300)^{3/2} N_{dl}^{-1} L_D^{-1} f^{-2} \cdot \text{ cm}^2/\text{V sec}$ ;  $E=1,6 \cdot 10^6 \left( \frac{\alpha'}{\mu_l \mu_d} \right)^{1/2}$ ;  $E=6,5 \cdot 10^5 \cdot \alpha^{1/2} \cdot \mu_l^{-1} \text{ V/cm}$ .



ság járulék térerősségfüggését. Az (V.39) formula kísérleti ellenőrzése nem látszik nehéz feladatnak. Az a tény, hogy az [V.3] dolgozatban nem kaptak jól definiált mozgékonyosság növekedést, egyszerűen azzal magyarázható, hogy a méréseket szoba-hőmérsékleten végezték, és a diszlokációkon való szóródás csak alacsonyabb hőmérsékleten lesz meghatározó [V.23.]. Jóllehet a diszlokációk hatásának mértéke még ma is vitatott,\* az eredő mozgékonyságban játszott szerepe alacsony hőmérsékleten jelentős lehet. Különösen akkor várható ez a hatás, ha a diszlokációk sűrűsége nagy. Így véleményem szerint Ross és Warfield méréseinek interpretálásánál [V.29], akik zafíron növesztett (p-típusú) szilícium rétegen szuper-lineáris áram-feszültség karakterisztikát találtak és igen nagy hibahely (diszlokáció) sűrűségű mintákat használtak, természetesebb munka-hipotézisnek látszik a diszlokációkon való szórás térfüggésének figyelembevétele, mint az általuk javasolt modell, amelyben a mintában keletkezett feszültségeknek a valencia-sáv szerkezetére gyakorolt hatását vették csak figyelembe.

A forró-elektronok (vagy lyukak) diszlokációkon történő rekombinációjának vizsgálata, melyet elsőnek javasoltam az [V.18] dolgozatomban, új lehetőségeket ad a diszlokációk pontosabb megismerésében.

Az a körülmény, hogy NDV-et explicite csak a (iii) esetre „jósoltam” meg, egyáltalán nem azt jelenti, hogy a forró elektronok élettartama nem változhat mérhető módon az (i) és (ii) esetben. Az NDV-re vonatkozó negatív állítások csak azt jelentik, hogy az alaptöltéshordozók befogásánál a  $g$  tunnelezési faktor rossz irányban változik. A fotovezetés vizsgálatánál azonban mind a három esetben várható az élettartam jelentős változása.

A kérdésről 1970-ben tartott előadásom (Symposium on Crystal Defects, Zakopane, 1970) is stimulálta *Figielskit* és munkatársait, akik 1971-ben valóban megfigyelték a fotovezetés csökkenését plasztikusan deformált germániumban folyékony nitrogén hőmérsékleten. A kísérleti eredményekről igen röviden számoltak csak be, [V.30], így pontos elemzésre nincs mód, de könnyű belátni, hogy (nagyságrendben) az általam javasolt modell és a kísérleti megfigyelés összhangban van. Valóban, ahhoz, hogy pl. (i) esetben a  $C(\alpha)$  jelentősen változzon,  $\alpha \approx 1$  kell legyen. Elhanyagolva a diszlokációktól eredő mozgékonyosság változást, 77 K-en a mozgékonytságot  $\mu_1 \approx 3 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$ -nak vehetjük. Mivel  $E = 6,5 \cdot 10^5 \alpha^{1/2}/\mu_1$  az  $\alpha = 1$  értéknél  $E \approx 20 \text{ V/cm}$  adódik.

Az idézett dolgozatban azt találták, hogy a fotovezetés kioltása  $E > 10 \text{ V/cm}$  elektromos térnél következik be. Lehet állítani, hogy ez az első kísérleti vizsgálat igen biztató a forró-elektronok diszlokációkon történő rekombinációjának vizsgálatában és várható, hogy az általam javasolt számítások nem csak a fenti nagyságrendi egyezést mutatják majd a részletesebb és pontosabb kísérleti vizsgálatokkal, hanem lehetőség nyílik a  $\tau$  élettartam és a  $\mu$  mozgékonyság térfüggésének pontos szétválasztására.

## VI. REKOMBINÁCIÓS HULLÁMOK DISZLOKÁCIÓKKAL

Az első fejezetben felsoroltam néhány félvezető anyagot és rekombinációs centrumot, amelyek lehetőséget adtak ún. rekombinációs hullámok keltésére. Ezen

\* Az újabb [V. 28] munkában nem kaptak olyan nagy mozgékonyosság csökkenést, mint *Pöddör* az idézett [V. 23] dolgozatban.



centrumok közös tulajdonsága, hogy mindig ponthibák voltak, és a negatívan töltött centrumoknak azt a tulajdonságát használták fel, hogy az elektronbefogás és lyukbefogás sebessége lényegesen különbözik egymástól ( $v_p \gg v_n$ ), ugyanakkor az  $\alpha \equiv \frac{p_0 v_p}{n_0 v_n} > 1$  feltétel is teljesül. Ebben a fejezetben azt vizsgálom meg, hogy (él)diszlokációk segítségével, tehát nem pontszerű rekombinációs centrumokkal lehetséges-e kvázi-neutrális rekombinációs hullámokat kelteni. Az előző fejezet alapján az alap gondolatot nyilván az adta, hogy a diszlokációk körül kialakuló makroszkópikus potenciál-barrier a befogási sebességek lényegesen eltérő értékéhez vezet és ez hasonló feltételeket biztosíthat, mint ami pl. az arannyal kompenzált szilíciumban áll elő.

A jelen fejezetben a következő programot kívánom megvalósítani. Az első pontban röviden áttekintem az elmélet eddigi eredményeit, kiválasztva azt a technikát, mely céljaimnak leginkább megfelel. A második pontban a diszlokációkon keresztül végbemenő rekombinációnak az előző fejezetben megadott modellje alapján meghatározom a kvázi-semleges rekombinációs hullámok diszperziós relációját és a kritikus mennyiségeket (elektromos tér, frekvencia). A harmadik pontban a levezetett formulák alapján megvizsgálom szilícium és germánium esetében a kvázi-neutrális rekombinációs hullámok gerjesztésének lehetőségét.

## VI. 1. A rekombinációs hullámok elméletének rövid áttekintése

*Konstantinov* és *Perel* alapvető munkája óta [VI.1] számos szerző foglalkozott a rekombinációs hullámok elméletével. Ez elsősorban azzal magyarázható, hogy a kísérleti tények egyre gyarapodtak és az eredeti elmélet és a kísérlet összehasonlítása során mutatkozó eltérések az elmélet további pontosítására, illetve általánosítására ösztönözték a kutatókat. Már az első kísérletnél is — amelyet Holonyak és Bevacqua végzett — két lényegesen különböző minta típusnál figyeltek meg oszcillációt. Az egyiknél ohmos kontaktusokat használtak és a nem-egyensúlyi hordozókat fénnnyel hozták létre, a másik kísérletsorozatnál p-i-n diódákat használtak és így az elektron-lyuk generációt a p, illetve n oldalról történő injekció okozza és az instabilitás az i-intrinsic tartományban jön létre. *Konstantinov* és *Perel* elméletében (a továbbiakban röviden K—P elmélet) azt az egyszerűsítést teszik, hogy ohmos kontaktusokat és végtelen hosszú mintát tételeznek fel, valamint elhanyagolják a tértöltést is. Ez indokolja a kvázi-neutrális hullám elnevezést. Nyilvánvaló, hogy a tértöltés és a minta véges voltának elhanyagolása éppen a p-i-n diódáknál jelentős, ahol már egyenáram esetben is zérustól különböző tértöltés lehet. A minta hosszának a kritikus értékek meghatározásánál is fontos szerepe van és tulajdonképpen az eredeti K—P féle elmélethez képest ebben a vonatkozásban történt a leglényegesebb pontosítás. Erre a kérdésre az alábbiakban részletesen kitérek.

További kérdés a rekombinációs centrumok és az egyensúlyi elektron- és lyukkoncentrációk viszonya.

Már a domén-instabilitásnál beláttuk, hogy a betöltött és betöltetlen centrumok egymáshoz való viszonya és az  $n_0$ -hoz való viszonya lényeges. Ez a probléma még karakterisztikusabb a rekombinációs hullámok esetén, ahol mint látni fogjuk, a hullámok létezésének szükséges feltétele, hogy az  $n_0$ , illetve  $p_0$  kisebb legyen, mint a



betöltött centrumok koncentrációja (pontosabban egy azzal arányos mennyiségről van szó).

A fenti észrevételek alapján az alábbi szempontokat célszerű figyelembe venni, amikor a rekombinációs hullámok elméletével foglalkozó munkákat kívánjuk rendszerezni:

Kvázi-neutralitás (a)

Tértöltés és diffúzió (b)

Tértöltés diffúzió nélkül (c)

Kritikus értékek ad hoc meghatározása (d)

Kritikus értékek meghatározása az impedancia pólusa, vagy határfeltételek alapján (e)

A rekombinációs centrumok nagy koncentrációja (f)

A rekombinációs centrumok kis koncentrációja (g)

A fenti szempontokhoz hozzá kell tenni azt, hogy mindvégig a lineáris elmélet keretei között maradunk. Érdekes, hogy a domén-instabilitással ellentétben a kísérleti adatok elsősorban a kritikus értékek (télerősség, frekvencia) meghatározására vonatkoznak és az amplitúdó függést nem vizsgálták szisztematikusan.

A [VI.1] dolgozatban *Konstantinov* és *Perel* a kvázi-neutralitás feltételezésével a Shockley-Read-Hall rekombinációs modellen belül határozták meg azokat a feltételeket, amelyek mellett a

$$\delta n = N_1 \exp i(kx - \omega t); \quad \delta p = P_1 \exp i(kx - \omega t) \quad (\text{VI.1})$$

$$\delta E = E_1 \exp i(kx - \omega t)$$

alakú hullámok csillapodás nélkül terjedhetnek. A megoldandó egyenleteket könnyen felírhatjuk az (I.1) — (I.5) általános egyenletek alapján. Mivel egyszerű  $S-R-H$  modelltől lehet kiindulni, az (I.5) tiszta befogási egyenletek alakja [I.61]; [VI.1]:

$$U_n = C_n(np_t - n_1n_t)$$

$$U_p = C_p(pn_t - p_1p_t),$$

ahol az egyes betűk értelme nyilvánvaló. A betöltött  $n_t$ , és betöltetlen centrumok koncentrációjára természetesen érvényes az  $n_t + p_t = N_t$  összefüggés.

Az áramokra felírt kifejezésekben a rekombinációs hullámok tárgyalásánál elhanyagolják a diffúziós együtthatók térfüggését. Ugyanezt a feltevést használják a  $\mu_n$ ,  $\mu_p$ -re vonatkozóan is. A kísérlet és az elmélet is azt mutatja, hogy a szóban forgó télerősségeknél  $E \approx 10^2$  V/cm, a szobahőmérséklet környezetében, a mozgékonyosság valóban csak keveset változik.

A kvázi-neutralitás azt jelenti, hogy a  $q$  tértöltést és annak időszerinti deriváltját zérusnak tekintjük és így az adódik, hogy

$$N_d - N_a + p - n - n_t = 0 \quad (\text{VI.2})$$

$$j_n + j_p = \text{konstans} \quad (\text{VI.3})$$

A második egyenletet az (I.10) általános egyenletből kapjuk a tett feltevések alapján.

Az egyenletek linearizálásánál az  $U_n$ ,  $U_p$  tiszta befogási sebességeket az alábbi



alakra hozhatjuk:

$$\begin{aligned} U_n &= v_n[(1+\beta_n)\delta n - \beta_n\delta p] \\ U_p &= v_p[(1+\beta_p)\delta p - \beta_p\delta n] \\ v_n &= C_n N_t(1-f_0); \quad v_p = C_p N_t f_0 \\ \beta_n &= \frac{n_0}{N_t f_0(1-f_0)}; \quad \beta_p = \frac{p_0}{N_t f_0(1-f_0)} \end{aligned} \quad (\text{VI.4})$$

és itt  $f_0$  a rekombinációs centrum betöltési valószínűségét adja:  $n_{t0} = N_t f_0$ ;  $p_{t0} = N_t(1-f_0)$ . Az előzőekben felsorolt tulajdonságok szempontjából a (g) eset a  $\beta_n, \beta_p \ll 1$  feltételeket jelenti. Ilyenkor

$$U_n = v_n \delta n; \quad U_p = v_p \delta p$$

ahonnan látszik, hogy  $\tau_n \equiv \frac{1}{v_n}$ ,  $\tau_p \equiv \frac{1}{v_p}$  éppen a szokásos élettartamokat jelentik.

A (VI.1) hullámalakban keresve a megoldást, a kontinuitási egyenletből, valamint a (VI.2), (VI.3) egyenletek alapján a  $\delta_n$ ,  $\delta p$ ,  $\delta E$ -re egy lineáris homogén egyenletrendszer adódik, amelynek determinánsát zérussá téve az  $\omega$  és  $k$  mennyiségekre felírható a keresett diszperziós reláció. Az egyszerű, de hosszadalmas számolás a következő alakú egyenlethez vezet:

$$a_0 k^2 + b_0 k + c_0 = 0 \quad (\text{VI.5})$$

ahol  $a_0$ ,  $b_0$ ,  $c_0$  az  $\omega$  és a probléma egyéb paramétereinek függvénye. A (VI.5) egyenlet két összefüggést ad a valós és a képzetes részek egyenlősége miatt. A kritikus értéket az eredeti dolgozatban [VI.1], valamint néhány későbbi munkában [VI.2], [VI.3] a következő meg gondolás alapján határozták meg.

A (VI.5) alapján kifejezték a kritikus teret a  $k$  függvényében és meghatározták az  $E(k)$  függvény minimumát. Ezt a meg gondolást kritizálták *Antognetti* és munkatársai és egy sor dolgozatban igen részletesen elemezték a kritikus értékek meghatározásának korrekt módját [VI.4]–[VI.6]. Ennek lényeges vonása, hogy a (VI.5) alakú diszperziós relációból a lehetséges gyökök rendelkezésre állnak ( $k_1$ ,  $k_2$ ) és a háttérfeltételekből kell a  $k_1$  és  $k_2$ -re vonatkozó feltételt levezetni anélkül, hogy újabb ad hoc feltételt, tehát pl. a minimalizálást használnánk. Az így felírható összefüggéssel teljesen azonos kifejezés adódik, ha a minta impedanciájának pólusait vizsgáljuk. A következő meg gondolás érvényes: tegyük fel, hogy a mintát (pl. diódát) egy ideális áram-generátorral beállítjuk egyenáramú munkapontjára. Ilyen feltétel mellett, amikor tehát váltóáramú szempontból nyitott kör van, az áramkör spontán oszcillációjának frekvenciáit az impedancia pólusai adják (Nyquist-kritérium).

Ugyancsak az impedancia pólusait határozzák meg *Weber* és *Ford* [VI.7], [VI.8]. Ezekben a munkákban azonban már nem a kvázi-neutralitást használják, hanem a diffúzió elhanyagolásával ún. „rekombinációs tértöltés-hullámokat” vizsgálnak p-i-n diódákban. A [VI.8] dolgozatban numerikusan integrálják az egyenleteket, figyelembe véve, hogy az egyenáramú megoldás sem lesz homogén, tehát már eleve van tértöltés a p-i-n struktúrában. A kritikus értékek meghatározásában ez nem ad lényeges járulékot. Szükséges megjegyezni, hogy jöllehet a háttérfeltételek szerepét legmélyebben *Antognetti* és *munkatársai* vizsgálták [VI.5], valószínűleg



nem volt tudomásuk *Konsztantinov* és *Tzarenkov* egyik korábbi munkájáról [VI.9], ahol véges mintáknál vizsgálták az oszcilláció feltételét, *ohmos kontaktus* esetében. Az így nyert feltétel megegyezik a [VI.4]—[VI.7]-ben felírt feltétellel. A meggondolás igen egyszerű. A  $(k_1, k_2)$  gyökök segítségével pl. a  $\delta n$ -re vonatkozó általános megoldás

$$\delta n = Ae^{ik_1x} + Be^{ik_2x} \quad (\text{VI.6})$$

alakban írható. A minta végpontjaiban — az  $x=0$  és  $x=L$  pontokban —  $\delta n(0)=0$ ,  $\delta n(L)=0$  értékeknek kell lenni, azaz az

$$A + B = 0 \quad (\text{VI.7})$$

$$Ae^{ik_1L} + Be^{ik_2L} = 0$$

egyenletrendszer adódik az  $A$ ,  $B$  mennyiségekre. Akkor van nem-triviális megoldás, ha

$$k_1 - k_2 = \frac{2\pi m}{L} \quad (\text{VI.8})$$

$$m = \pm 1, \pm 2, \dots$$

A (VI.8) egyenlet fizikai interpretálása igen egyszerű: a két,  $k_1$ , illetve  $k_2$  hullám-számú haladó hullámnak a minta végpontjaiban ki kell oltani egymást, ezért fázis-különbségük  $2\pi$  egészszámú többszörösében különbözhetnek csak. Teljesen azonos feltételt vezetett le Antognetti arra az esetre is, amikor a kontaktusok injektálók voltak [VI.5]. A fenti előkészítés után e fejezet bevezetőjében kitűzött cél már megvalósítható: a diszlokációkon történő rekombináció esetén vizsgálhatom a (VI.8) feltétel mellett a kvázi-neutrális rekombinációs hullámok lehetőségét [VI.10].

## VI. 2. Kvázi-neutrális rekombinációs hullámok diszlokációkkal

A jelen tárgyalásnak megfelelő kísérleti elrendezés a következő: egy rúd-alakú mintában éldiszlokációkat hozunk létre, pl. plasztikus deformáció útján. A minta végeit *ohmos kontaktusokkal* látjuk el. Az áram az éldiszlokációkra merőleges irányban folyik. Vizsgáljuk, hogy ilyen feltételek mellett keletkezhetnek-e rekombinációs hullámok, és ha igen, mi lesz a kritikus térerősség és frekvencia értéke.

A fenti probléma-felvetés azt jelenti, hogy nem vizsgáljuk a Weber-Ford-féle rekombinációs tértöltés-hullámokat, amelyek kísérleti megvalósításánál p-i-n diódákat szokás használni. A diszlokációkon keresztül történő rekombináció lineárizált kifejezését az (V.11) egyenletben már meghatároztam. A rekombinációs hullámok elméletében szokásos jelölések (lásd (VI.4) egyenletek) megkívánják, hogy egy kissé más alakban írjam fel az  $U_n$ ,  $U_p$  linearizált kifejezéseit. Némi átalakítás után (V.11) a következő alakra hozható:

$$U_n = v_n[(1 + \beta_n)\delta n - \beta_n\delta p] \quad (\text{VI.9})$$

$$U_p = v_p[(1 + \beta_p)\delta p - \beta_p\delta n]$$

ahol az egyes betűk jelentése nyilván különbözik a (VI.4) egyszerű  $S-R-H$  modell-



nél használt mennyiségekétől:

$$v_p = C_n N(1 - f_0) \exp(-f_0 K_1); \quad v_p = C_p N f_0 \exp(+f_0 K_1)$$

$$\beta_n = \frac{n_0}{N} A^*; \quad \beta_p = \frac{p_0}{N} A^* \quad (\text{VI.10})$$

$$A^* = \frac{K_2 f_0 (1 - f_0) + 1}{f_0 (1 - f_0)}$$

A fentiekben szereplő  $K_1, J_2$  mennyiségeket az (V.9) és (V.10) egyenletek definiálják a diszlokációkra és az anyagra jellemző  $E_0, f_0$  és  $f_c$  mennyiségek segítségével. A kvázi-neutralitást elfogadva foglaljuk össze a megoldandó egyenleteket:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial j_n}{\partial x} &= -U_n \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial j_n}{\partial x} &= -U_p \\ j_n + j_p &= \text{konst.} \\ N_d^* + p - n - n_t &= 0 \\ n_t + p_t &= N \end{aligned} \quad (\text{VI.11})$$

ahol az  $U_n, U_p$  tiszta befogási sebességeket a (VI.9) kifejezések adják, amelyekben a kellemetlen  $n_t$ , illetve  $p_t$  változókat már elimináltuk. A  $\delta n, \delta p, \delta E$  változókat a (VI.1) alakban írjuk fel és a két kontinuitási egyenletbe, valamint a  $j_n + j_p = \text{konst.}$  egyenlet alapján nyerhető  $\delta j_n + \delta j_p = 0$  egyenletbe behelyettesítve felírhatjuk a keresett egyenletrendszer. A homogén-lineáris egyenletrendszer nem triviális megoldását, determinása zérus volta biztosítja.

Ennek alapján — hosszadalmas számolás után — az alábbi diszperziós reláció adódik, a valós  $k$  és valós  $\omega$  mennyiségek között  $[\Omega \equiv \omega / (v_n + v_p)]$ :

$$a_0 k^2 + b_0 k + c_0 = 0 \quad (\text{VI.12})$$

$$a_0 = L_d^2 (i\Omega - g - r)$$

$$b_0 = l[\Omega(c_p - c_n) + i\varphi_0 + ir(c_p - c_n)]$$

$$c_0 = \Omega^2 - \varphi + i\Omega(1 + r)$$

$$L_d^2 = D(v_n + v_p)^{-1}; \quad l = \mu E_s(v_n + v_p)^{-1};$$

$$g = \frac{v_n c_n + v_p c_p}{v_n + v_p}; \quad r = \frac{v_n \beta_n + v_p \beta_p}{v_n + v_p}$$

$$\varphi_0 = \frac{v_p c_p - v_n c_n}{v_n + v_p}; \quad \varphi = \frac{v_n v_p (1 + \beta_n + \beta_p)}{(v_n + v_p)^2}$$



$$\mu = \frac{\mu_n \mu_p (n_0 + p_0)}{n_0 \mu_n + p_0 \mu_p}; \quad D = \frac{kT}{q} \mu$$

$$c_p = \frac{p_0}{n_0 + p_0}; \quad c_n + c_p = 1.$$

E<sub>s</sub> a térerősség stationer értéke.

Ez a diszperziós reláció annyiban tér el a [VI.3]-ban levezetett kifejezéstől, hogy a  $v_n$ ,  $v_p$ ,  $\beta_n$ ,  $\beta_p$  mennyiségekben a diszlokációk specifikus tulajdonságai figyelembe vannak véve. A továbbiakban azonban a [VI.3]-tól eltérően határozom meg a kritikus értékeket, éspedig a (VI.8) feltétel alapján, A (VI.12)-ből kapható gyököket a (VI.8)-ba helyettesítve, a négyzetre-emelés után adódik:

$$b_0^2 - 4a_0 c_0 = \beta_m^2 a_0^2 L_d^{-2} \quad (\text{VI.13})$$

$$\beta_m \equiv \frac{2\pi m L_d}{L}.$$

(VI.13) két egyenletet jelent, hiszen mind a valós, mind a képzetes részre érvényesnek kell lenni. A számolás eredménye az alábbi két egyenlet:

$$l^2 \{ \Omega^2 \cdot (c_p - c_n)^2 - [\varphi_0 + r(c_p - c_n)]^2 \} + 4L_d^2 [\Omega^2 - \varphi] (g + r) + \Omega^2 (1 + r) = \beta_m^2 L_d^2 [-\Omega^2 + (g + r)^2] \quad (\text{VI.14})$$

$$l^2 (c_p - c_n) [\varphi_0 + r(c_p - c_n)] - 2L_d^2 [\Omega^2 - \varphi - (g + r)(1 + r)] = \beta_m^2 L_d^2 (g + r). \quad (\text{VI.15})$$

A fenti két egyenlet alapján a kritikus dimenziótlan frekvenciát és a kritikus dimenziótlan térerősséget meg lehet határozni. Ez utóbbit az  $\mathcal{E}_{cm} = l/L_d$  hányadossal definiáljuk. A számítás egyszerűsítése végett feltételezzük, hogy  $\Omega^2 \ll \varphi + (g + r) \cdot (1 + r)$ , amit a posteriori könnyű ellenőrizni. Ekkor (VI.15) alapján az  $\mathcal{E}_{cm}^2$  azonnal felírható:

$$\mathcal{E}_{cm}^2 = \frac{2[\varphi + (g + r)(1 + r)] + \beta_m^2 (g + r)}{(c_n - c_p)[\varphi_0 + r(c_p - c_n)]}, \quad (\text{VI.16})$$

Az  $m$  index arra utal, hogy az „ $m$ ” módus-számhoz tartozó térerősségről van szó.

A dimenziótlan kritikus frekvenciát a (VI.14) egyenletből határozhatjuk meg. A szükségtelenül komplikált írásmódot elkerülve,  $\Omega_{cm}$ -be az  $\mathcal{E}_{cm}$  kifejezését nem helyettesítem be:

$$\Omega_{cm}^2 = \frac{\mathcal{E}_{cm}^2 [\varphi_0 + r(c_p - c_n)]^2 + 4\varphi(g + r) + \beta_m^2 (g + r)^2}{\mathcal{E}_{cm}^2 (c_p - c_n)^2 + 4(1 + g + 2r) + \beta_m^2} \quad (\text{VI.17})$$

A (VI.16) egyenletből a kvázi-neutrális hullámok gerjesztésének szükséges feltételét könnyű megállapítani. Valóban, a baloldalon  $\mathcal{E}_{cm}^2$  áll, ami nyilván pozitív mennyiség. A jobboldalon egyetlen mennyiség (amely  $n$ -típusú anyagot feltételezve) negatív lehet a  $\varphi_0 + r(c_p - c_n)$  kifejezés. A  $\varphi_0 + r(c_p - c_n) > 0$  feltételből adódik:

$$F(\alpha) \equiv \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1} - \frac{n_0 - p_0}{N} A^* > 0 \quad (\text{VI.18})$$

$$\alpha \equiv \frac{p_0 v_p}{n_0 v_n} = \frac{p_0}{n_0} \cdot \frac{C_p}{C_n} f_0 (1 - f_0)^{-1} \cdot \exp(2f_0 K_1).$$

Az elmélet lényeges paramétere az  $\alpha$  dimenziótlan mennyiség. Amennyiben  $\frac{n_0 - p_0}{N} \rightarrow 0$ -hoz, úgy az  $F(\alpha) > 0$  feltétel  $\alpha > 1$  kritériumhoz vezet. Mint látni fogjuk, diszlokációk esetén mindkét tag lényeges, mivel  $N$  értékét nem növelhetjük anélkül, hogy a Read-féle modell érvényét ne veszítené. A pontthibákra vonatkozó elmélet megfelelő formulái  $K_1 \rightarrow 0$ ,  $K_2 \rightarrow 0$  határátmenettel kaphatók. Ezeket most nem vizsgálom, mivel elsősorban az a kérdés érdekes, hogy diszlokációk esetén milyen lehetőség van a (VI.18) feltétel teljesítésére.

Mielőtt a konkrét számolást elvégezném, két megjegyzés szükséges. Az egyik a térerősség és a frekvencia „ $m$ ” módusszámtól való függésére vonatkozik. A várákozásnak megfelelően  $m$  növelésével a kritikus térerősség is növekszik, míg a kritikus frekvencia  $m=1$  és  $m \rightarrow \infty$  között — amint erről könnyű meggyőződni — viszonylag szűk határok között változik. A másik megjegyzés keretében azt a speciális esetet vizsgálom, amikor a minta erősen  $n$ -típusú  $n_0 \gg p_0$ , de mégis  $\alpha \gg 1$ . Ilyenkor nyilván  $v_n/v_p \ll p_0/n_0$ . Most a (VI.12) egyenletben szereplő mennyiségek jelentősen egyszerűsödnek és a következő kifejezések adódnak:

$$g \approx p_0/n_0; \quad r \approx \beta_p; \quad \varphi_0 \approx p_0/n_0;$$

$$\varphi \approx (1 + \beta_n) \frac{v_n}{v_p}; \quad \mu \approx \mu_p; \quad D \approx D_p;$$

$$c_p \approx p_0/n_0; \quad L_d^2 \approx D_p/v_p \equiv L_p^2;$$

$$l \approx \mu_p E_s/v_p \equiv l_p; \quad \Omega \approx \omega/v_p.$$

Tegyük fel még azt is, hogy a minta elég hosszú és így, ha nem túl nagy módus-számhoz tartozó értékeket keresünk, a  $\beta_m$  elhanyagolható. (E feltevés nélkül is könnyen levezethetők a megfelelő kifejezések).

A következő közelítés érvényes:

$$\mathcal{E}_{cm}^2 \approx \frac{2(1 + \beta_n)}{1 - \beta_n} \quad (\text{VI.19})$$

$$\Omega_{cm}^2 \approx \left( \frac{p_0}{n_0} \right)^2 \cdot \frac{1 - \beta_n + 2/\alpha}{3 - \beta_n} (1 - \beta_n^2) \quad (\text{VI.20})$$

Most a (VI.18) kritérium a  $\beta_n < 1$  feltételre egyszerűsödik. Mivel a (VI.19)–(VI.20) egyenletek levezetésénél nem tételeztem fel, hogy  $\beta_n \ll 1$ , a  $2/\alpha$  mennyiséget a (VI.20) számlálójában nem lehet elhanyagolni az  $1 - \beta_n$  mellett. Ha a  $\beta_n \ll 1$  feltétel is igaz,

akkor  $\mathcal{E}_{cm}^2 \approx 2$ ;  $\Omega_{cm}^2 \approx \frac{1}{3} \left( \frac{p_0}{n_0} \right)^2$ . Így a kritikus elektromos tér és a kritikus frekvencia

$$E_{sc} \equiv \frac{kT}{q} \frac{\sqrt{2}}{L_p}; \quad f_c \equiv \omega_c/2\pi \approx \frac{v_n \alpha}{\sqrt{3}}.$$

Világos, hogy ha  $\beta_n$  egyhez közeli értéket is felvehet, akkor a kritikus elektromos tér most megadott értékét az  $(1 + \beta_n)^{\frac{1}{2}} (1 - \beta_n)^{-\frac{1}{2}}$  faktorral, míg a frekvenciát  $(1 - \beta_n + 2/\alpha)^{\frac{1}{2}} \cdot (1 - \beta_n^2)^{\frac{1}{2}} \cdot (1 - \beta_n/3)^{-\frac{1}{2}}$ -el kell megszorozni.



### VI. 3. Alkalmazás szilíciumra és germániumra, az eredmények diszkussziója

Az elmélet alkalmazása szempontjából a szilíciumot és a germániumot választottam, mivel ismeretem szerint ezekben az anyagokban tanulmányozták legrésztesebben az éldislokációkat. Természetesen hasonló megfontolások más félvezetőkre, pl. GaAs-re CdS-re is érdekes lenne, hiszen éldislokációk keltése ezekben az anyagokban is lehetséges. A VI.2. pontban levezetett általános formulák alkalmazása mindenek előtt az egyensúlyi értékek meghatározását teszi szükségessé, azaz az  $f_0$  és az  $n_0$ ,  $p_0$  értékekét.

A VI.1. Táblázatban feltüntettem a Si-ra és Ge-ra vonatkozó adatokat, amelyeket a numerikus számításoknál használtam\*. Az (V.16), (V.17) egyenletrendszer alapján számolt  $f_0$ ,  $n_0$ ,  $p_0 = n_i^2/n_0 - t$  a hőmérséklet függvényében  $N_d^*$  különböző értékeinél,  $N = N_{dl}/a = 3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  esetre a VI.2. Táblázatban adtam meg. Látható, hogy az  $f_0$  hőmérséklet-függése igen jó közelítéssel lineáris (kivéve az  $N_d^* = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$

VI. 1. TÁBLÁZAT

	Si	Ge
$E_0$ eV	0,365	0,225
$E_2$ eV	0,520	0,175; 0,350
$a$ Å	3,34	4,00
$N$ $\text{cm}^{-3}$	$3 \cdot 10^{13}$ ; $4,5 \cdot 10^{13}$	$8 \cdot 10^{13}$
$C_n$ $\text{cm}^3/\text{sec}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$4 \cdot 10^{-8}$
$N_c$ $\text{cm}^{-3}$	$5,389 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	$2,0 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$
$n_i^2$ $\text{cm}^{-6}$	$1,06 \cdot 10^{31} \cdot T^3 \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$	$2,353 \cdot 10^{30} \cdot T^3 \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$
$E_g$ eV	$1,205 - 2,8 \cdot 10^{-4} \cdot T$	$0,782 - 3,9 \cdot 10^{-4} \cdot T$
$\mu_n$ $\text{cm}^2/\text{Vsec}$	$4 \cdot 10^9 \cdot T^{-2,6}$	$4,9 \cdot 10^7 \cdot T^{-1,66}$
$\mu_p$ $\text{cm}^2/\text{Vsec}$	$2,5 \cdot 10^8 \cdot T^{-2,3}$	$1,05 \cdot 10^9 \cdot T^{-2,33}$
$N_d^*$ $\text{cm}^{-3}$	$10^{12}$ ; $3 \cdot 10^{12}$ ; $10^{13}$ ; $10^{14}$	$3,2 \cdot 10^{12}$

\* A számításokat HP 9100 B típusú asztali kalkulátorral végeztem. Egy adott hőmérsékletnél az értékek 2 percen belül adódtak. A táblázatok e fejezet végén találhatók.

esetben), amint azt az (V.21) formula alapján várni lehetett. Részletesebben vizsgáltam az  $N_d^* = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  esetet. A VI.3. Táblázatban megadtam  $N = 4,5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  diszlokációs állapot-sűrűség esetére az  $f_0$ ,  $n_0$ ,  $p_0$  értékeit 300–350 K között. A VI.4. Táblázat tartalmazza ugyanezen paraméter-értékek mellett a  $v_p/v_n$ ,  $\alpha$  és az  $F(\alpha)$  értéket. Látható, hogy a  $C_p/C_n = c = 1$  esetben  $F(\alpha) < 0$ , ugyanakkor, ha  $c = 2, 4, 6$ , akkor nemcsak az  $\alpha > 1$ , hanem az  $F(\alpha) > 0$  feltétel is teljesülhet.

VI. 2. TÁBLÁZAT

$N_d^* \text{ cm}^{-3}$ Si:	$10^{12}$	$3 \cdot 10^{12}$	$10^{13}$	$10^{14}$
$T \backslash f_0$	$\times 10^{-2}$	$\times 10^{-2}$	$\times 10^{-2}$	$\times 10^{-2}$
250	3,261	4,994	6,011	8,049
260	3,205	4,797	5,813	7,861
270	3,128	4,600	5,615	7,672
280	3,032	4,403	5,417	7,482
290	2,920	4,206	5,218	7,292
300	2,795	4,010	5,019	7,101
310	2,661	3,814	4,820	6,910
320	2,522	3,619	4,621	6,718
330	2,385	3,424	4,422	6,525
340	2,258	3,232	4,223	6,333
350	2,160	3,043	4,025	6,139

VI. 3. TÁBLÁZAT

$\text{Si}: N_d^* = 10^{12} \text{ cm}^{-3} ; N = 4,5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$			
T	$f_0$ $\times 10^{-2}$	$n_0$ $\times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	$p_0$ $\times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
300	2,151	0,331	0,127
310	2,111	0,540	0,385
320	2,061	0,838	1,116
330	2,010	1,263	3,057
340	1,970	1,905	7,706
350	1,969	2,917	17,79



Az elméletnek a fentiek alapján egyetlen szabad paramétere van, a  $C_p/C_n$  hányados.

Meghatározható most a kritikus elektromos tér és a kritikus frekvencia értéke is felhasználva a VI.1. Táblázat Si-ra vonatkozó egyéb adatait. A (VI.16) és (VI.17) formulákba behelyettesítve a  $C_p/C_n=c=4$  és  $T=300$  K-re vonatkozó értékeket  $E_{sc} \approx 40$  V/cm,  $f_c = \omega_c/2\pi \approx 8$  kHz adódik.

Ugyancsak könnyű meggyőződni arról, hogy a dimenziótlan frekvenciára tett azon feltevés, hogy  $\Omega_c^2 \ll \varphi + (g+r)(1+r)$  valóban teljesül. Ezek a kritikus értékek

VI. 4. TÁBLÁZAT

Si: $N_d^* = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ; $N = 4,5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$						
T	$C_p/C_n = c = 1$			c = 2	c = 4	c = 6
	$v_p/v_n$	$\alpha$	$F(\alpha)$	$F(\alpha)$	$F(\alpha)$	$F(\alpha)$
300	18,89	0,723	-0,336	+0,008	0,311	0,451
310	12,73	0,905	-0,318	+0,020	0,299	0,421
320	8,453	1,126	-0,320	+0,006	0,257	0,363
330	5,718	1,384	-0,327	-0,019	0,206	0,297
340	4,142	1,680	-0,313	-0,026	0,175	0,253
350	3,547	2,160	-0,187	+0,069	0,238	0,302

VI. 5. TÁBLÁZAT

Ge: $N_d^* = 3,2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ; $N = 8 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ; $E_g = 0,35 \text{ eV}$						
T	$f_0$ $\times 10^{-2}$	$n_0$ $\times 10^{11}$	$p_0$ $\times 10^{10}$	$v_p/v_n$ $\times 10^3$	$\alpha$	$F(\alpha)$
200	3,877	0,989	0,034	3,323	11,55	+0,579
210	3,782	1,764	0,194	1,352	14,86	+0,431
220	3,659	2,828	0,991	0,539	18,90	+0,236
230	3,524	4,259	4,521	0,223	23,69	+0,028
240	3,412	6,456	17,54	0,155	42,16	-0,108
250	3,362	10,58	54,92	0,067	34,62	-0,166

nagyságrendileg megegyeznek a Zn-el kompenzált Si-nál kísérletileg talált értékekkel [I.49]. Ez egyben azt is jelenti, hogy *szilíciumban, a használt paraméter-értékek mellett*, viszonylag kis tereknél lehet diszlokációk segítségével rekombinációs hullámokat kelteni, ha  $C_p/C_n > 1$ . Jelenleg nem ismerek olyan kísérleti tény, amely ennek a feltevésnek ellent mondana. Mint látni fogjuk Ge esetében a  $C_p \approx C_n$  feltevés is ele-



gendő. A germánium esetére végzett numerikus számolások ismertetése előtt szükséges néhány megjegyzést tenni a VI.1. Táblázat adataira vonatkozóan. Látható, hogy az  $E_2$  „valódi” akceptor nivónál két értéket adtam meg. Ez azzal kapcsolatos, hogy a kísérleti munkák egy részében a vezetési sáv alatt mélyen fekvő energia-nívót kaptak, mint pl. *Figielski* [V.8], *Pöddör* [V.23], másrészt pl. *Osipyan* és *Schevchenko* [V.28] viszonylag kis értéket. Fizikailag nyilvánvaló, hogy az utóbbi esetben az  $f_0$  betöltési valószínűség értéke olyan alacsony lesz, hogy olyan hőmérsékleteken amikor a  $p_0$  is számottevő, a betöltött diszlokációk értéke  $Nf_0$  kisebb lesz az  $n_0$  értékénél, ami kedvezőtlen a rekombinációs hullámok gerjesztésének szempontjából. A konkrét számolás valóban azt mutatja, hogy  $E_2=0,175$  eV esetén  $F(\alpha)<0$  érték adódik, ha *Figielski* kísérletei alapján elfogadjuk, hogy  $C_p \approx C_n$ , vagy legalábbis  $C_p$  nem sokkal nagyobb  $C_n$ -nél. Lényegesen kedvezőbb a helyzet a mélyebben fekvő diszlokációk esetében. Ilyenkor  $f_0$  értéke 200–250 K körül már elég nagy ahhoz, hogy a betöltött diszlokációs akceptor-állapotok koncentrációja nagyobb legyen az elektronok koncentrációjánál. Természetesen ehhez igen tiszta, közel intrinsic anyagot kell használni.  $E_2=0,350$  eV;  $N_d^*=3,2 \cdot 10^{12}$  cm<sup>-3</sup> effektív donor-koncentrációnál és  $N_{dl}/a=N=8 \cdot 10^{13}$  cm<sup>-3</sup> diszlokációs akceptor-állapot mellett vizsgáltam a (VI.18) feltétel teljesíthetőségét,  $C_p=C_n$  esetben. A VI.5. Táblázatból látható, hogy könnyen található olyan hőmérsékleti tartomány, ahol nem csak az  $\alpha>1$ , hanem az  $F(\alpha)>0$  feltétel is teljesül. Ugyanakkor növekvő hőmérsékletnél az  $F(\alpha)>0$  feltétel nem teljesül, mivel  $f_0$  értéke csökken és így a (VI.18)-ban szereplő  $\frac{n_0-p_0}{N} A^*$  értéke nő.

Megjegyzem, hogy az  $\alpha$  értéke ugyanakkor növekszik, ami első pillanatra arra a következtetésre ösztönözhet, hogy az instabilitás feltétele könnyebben teljesíthető. Az a tény azonban, hogy az  $F(\alpha)$  függvény pozitív volta az instabilitás szükséges feltétele, mutatja, hogy az  $\alpha$  növekedéséből még nem lehet következtetést levonni a kritikus elektromos tér csökkenésére vonatkozóan. Valóban, 230–240 K között  $\alpha$  csak keveset változik, ugyanakkor az  $F(\alpha)$  zérussá válik és így a kritikus tér értéke végtelen lesz. A szilíciumhoz hasonlóan kiszámíthatjuk, pl. 200 K-en a kritikus térerősséget és frekvenciát. Az egyszerű számítás mutatja, hogy:  $E_{sn} \approx 25$  V/cm;  $f_c \approx 10$  kHz.

Végül néhány megjegyzést szükséges tenni arra vonatkozóan, hogy a numerikus számításokat csak 200 K felett végeztem. Az előző fejezetben beláttuk, hogy alacsony hőmérsékleten (180 K alatt) a tunnelezés is jelentős lehet a diszlokációkon való befogás leírásánál. Ilyenkor nemcsak a ún. „elsődleges diszlokációs állapotok” (primary dislocation states) játszanak szerepet, hanem a sávokhoz közelebb fekvő másodlagos diszlokációs állapotok, vagy sávok is éreztetik hatásukat [V.12], ami abban nyilvánul meg, hogy a  $C_n$ ,  $C_p$  befogási paraméterek már explicite függhetnek a térerősségtől. A rekombinációs hullámok keltésénél a forró elektron effektusoktól eltekintettem, a  $C_n$ ,  $C_p$  paramétereket állandóknak tekintettem. Alacsonyabb hőmérsékleten (és ez nyilvánvaló a  $p_0 \approx n_i$  erős hőmérséklet-függése miatt) egyébként sem lehet az  $\alpha>1$  feltételt biztosítani. Az a szerencsés helyzet állt elő, hogy ott, ahol az elmélet feltevései már nem érvényesek, nem is várhatunk rekombinációs hullámokat. A fenti numerikus számolást  $n$  típusú szilíciumra és germániumra végeztem, jóllehet az elmélet  $n$ -és  $p$ -típusú anyagra egyaránt érvényes. Sőt, könnyű felírni az intrinsic anyagra vonatkozó kritikus tér és frekvencia kifejezést is. Ekkor, természetesen nem a (VI.16) egyenletet kell alkalmazni, amely  $n_0=p_0$  (azaz  $C=C_p$ )



esetén divergál, hanem az általános (VI.14) és (VI.15) összefüggésekből kell számolni. Az így felírható kifejezések a [VI.4] dolgozat eredményeinek általánosításai arra az esetre, amikor a betöltött, illetve üres centrumok koncentrációjáról nem tehetjük fel, hogy jóval kisebb, mint az egyensúlyi elektron-, illetve lyuk-koncentráció.

## VII. AZ EREDMÉNYEK ÖSSZEFOGLALÁSA, JAVASLATOK

Mielőtt értekezésem fontosabb eredményeit összefoglalom, egyetlen kérdést szeretnék röviden érinteni.

Az I. fejezetben szó volt arról, hogy *Ridley* a minimális entrópiaprodukción elvét alkalmazva bizonyította a domének (vagy áramszálak) egzisztenciáját. Az elv alkalmazása azért lett volna célszerű, mert a DAP-módszer keretében a domén alakját nem lehet megadni. Azt vagy a kísérletekből kell venni, vagy számítógépes módszerek segítségével kell meghatározni. Amennyiben ilyen adatok nem állnak rendelkezésre, akkor pl. a (II.82) függvény  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , ... paraméterei ismeretlenek. A minimális entrópiaprodukción elvének alkalmazása újabb összefüggést adhatott volna (a Riemann-féle megoldás keretében) a fenti paraméterek között.

Az elv alkalmazása az egyensúlytól távol természetesen indokolatlan, hiszen bizonyítva csak a lineáris elmélet keretében van. Felmerült a Glansdorff-Prigogine-féle „general evolution criterion” alkalmazásának lehetősége, amelynek éppen az a célja, hogy az egyensúlytól távoli jelenségeket is egy variációs elvből származtassa [I.1]. A kérdés vizsgálatával — a domén-instabilitások szempontjából — a [VII.1—VII.3] dolgozatok foglalkoztak. A [VII.3]-nak csak az összefoglalója ismeretes. Az elv alkalmazásától az a körülmény tartott vissza, hogy matematikai megfogalmazását számos kritika érte [VII.4.—VII.6]. Így pl. *Roberts* és *Fényes* ellenpéldán mutatták be, hogy a variációs elv nem egyértelmű. E kérdéssel részletesen nem kívánok foglalkozni, csak emlékeztetek arra, hogy az autonóm differenciálegyenlet-rendszerek elméletében nem ismeretes a határciklus szükséges és elegendő feltétele és aligha várható, hogy a Glansdorff-Prigogine-féle elv alapján ki lehetne választani ezt a megoldást. Így inkább az eredeti fenomenológikus egyenletek vizsgálatával foglalkoztam és nem vizsgáltam azt a kérdést, hogy milyen közelítést ad az elv alkalmazása a domén alakjára. Értekezésemben lényeges helyet foglal el a domén-mozgás nem-lineáris analízise, valamint a NDV új lehetőségének vizsgálata diszlokációk részvételével. Ugyancsak diszlokációk jelenlétében vizsgálom a kvázi-neutrális rekombinációs hullámok lehetőségét.

A fenti területen elért legfontosabb eredményeinek a következőkben foglalom össze.

1. Új módszert dolgoztam ki a stacioneren mozgó nagy térerősségű domének sebességének ( $u_0$ ) és a domén-mozgás ideje alatt folyó áram ( $j_s$ ) meghatározására, mely először veszi figyelembe a domén alakját. Az általam bevezetett domén-alak-paraméterek (DAP) megfelelő választásával, a korábbi munkák vonatkozó eredményei speciális esetként kiadódnak. A domén-alak-paraméterek becslése alapján megmutattam, hogy a Gunn-domének gyakorlatilag alaktól függetlenül mozognak, míg a rekombinációs-domének mozgása érzékeny a domén alakjára, aszimmetriájára.

Megmutattam, hogy a domén-alak-paraméterek megjelenése a domén mozgás nem-lokális tulajdonságának következménye. A DAP-módszer termé-



szetes következménye, hogy a kísérletileg megfigyelt  $(\mu_0) = k j_s$  összefüggésben a  $k$  általában feszültség-függést mutat.

2. A DAP-módszert alkalmaztam a csapdák hatásának vizsgálatára mind a rekombinációs, mind a Gunn-domének esetében. Megmutattam, hogy a lokális egyensúly (kvázi-egyensúly) feltételezése mellett a csapdák sem vezethetnek az  $u_0$  és  $j_s$  különböző feszültség-függéséhez.

Elsőnek határoztam meg a Gunn-domének sebességét (és az áramot) abban az esetben, amikor a nagymozgékonyosságú illetve kismozgékonyosságú állapotok és a csapdák közötti átmenetek időállandói különböznek.

3. A DAP-módszer segítségével levezetett kifejezéseket összevetettem
  - a) *Sacks* és *Milnes* számítógépes vizsgálatával és megmutattam, hogy még kevésbé aszimmetrikus domén esetén sem lehet elhanyagolni a doménalak-paramétereket az  $u_0$  és  $j_s$  meghatározásában.
  - b) Megmutattam, hogy arannyal kompenzált germániumban a doménsebesség helyes nagyságrendjét és feszültség-függését aszimmetrikus domén írja le.
  - c) Elemeztem féliszigetelő (oxigénnel kompenzált) GaAs-ben mozgó lassú domének eredetét. A domének nagy valószínűséggel úgy tekinthetők, mint lelassult Gunn-domének.

4. *Bonch—Bruevich* által felvetett problémára válaszolva megmutattam, hogy a stationerén mozgó Gunn-domének és rekombinációs domének külső perturbáció hatására akkor viselkednek hasonlóan, ha a NDV-t biztosító mechanizmus kinetikáját figyelembe vesszük, illetve, hogy mindkét domén tisztán relaxációs módon viselkedik, ha kvázi-egyensúlyt tételezünk fel a kis és nagymozgékonyosságú állapotok között.

5. Elsőnek mutattam meg, hogy a forró-elektronok élettartama jelentősen csökken, ha az élettartamot diszlokációk határozzák meg. Forró-elektronok esetére meghatároztam a diszlokációkon szóródó elektronok mozgékony-ság-járlékát és rámutattam a negatív differenciális vezetőképesség fellépésének lehetőségére.

A Glaenger-Jordan féle rekombinációs modell megjavításával mód nyílt az élettartam diszlokáció-koncentráció függésének analizisére, a kísérleti megfigyelésekkel összhangban.

6. Megvizsgáltam a kvázi-neutrális rekombinációs hullámok gerjesztésének lehetőségét diszlokációkkal, mint mély centrumokkal. Megmutattam, hogy mind germániumban, mind szilíciumban reális paraméterek feltételezésével, mód van rekombinációs hullámok keltésére.

A fenti eredmények elméleti vizsgálatokból származnak. Mint a bevezetőben említettem, az áraminstabilitásokkal kísérleti vonatkozásban kezdtem foglalkozni és néhány új eredmény ezen a területen is született.

Úgy gondolom, hogy a fizikus akkor érezheti munkáját eredményesnek, ha

- a) új effektusokat sikerül kimutatni, vagy „megjósolni”,
- b) ha meglevő kísérleteket interpretál, vagy
- c) új alkalmazásokat javasol, illetve valósít meg.

Az áraminstabilitások területén végzett kutatásaim során mindig közel voltam a kísérletekhez, így a c) szempont is mindig közel állt hozzám.

Két olyan megvalósított javaslatomat említek, amelyekre részletesen az értekezésemben nem tértem ki.



- c.1. Az oszcillisztor vizsgálata során javasoltam az ún. „Field Effect Oscillator” megvalósítását, amelynek segítségével pl. frekvencia-löket generátor állítható elő.

A kérdés fizikai alapjait az [I.58], [VII.7] dolgozatokban közöltük. Megvalósítása *Lőrinczy András*sal együtt történt (és 1965-ben szabadalmaztattuk). Mivel az elérhető frekvenciák alacsonyak, felhasználására nem került sor.

- c.2. A termikus letörések vizsgálata során [I.36], [I.37], [VII.8], a felületen megfigyelt áramszálakat javasoltam felhasználni (előírt geometriájú) p-n átmenet készítésére. A megolvadt áramszálba megfelelő adalékoló anyag vihető a p-n átmenet kialakítására. Megvalósítása (és szabadalmaztatása) *Henk Károly*-lyal és *Sallay Bélá*val közösen történt. Mint az [I.37]-ben megmutattuk, a p-n átmenet karakterisztikája közel azonos az ipari diódák szokásos karakterisztikaival.

Az értekezés fontosabb eredményeinek összefoglalásánál a *b)* kategóriába tartozó javaslatok megtalálhatók ( $u_0$ ,  $j_s$  különböző feszültség-függésének,  $u_0$  nagyságrendjének kérdése, stb)„, így ezeket itt nem ismételtem meg.

Célszerű azonban az *a)*-hoz sorolható javaslatok közül az alábbiakat kiemelni:

- a.1. A forró-elektronok rekombinációját diszlokációkon *Figielski* 1971-ben megfigyelte. Ez a terület még nem tekinthető kísérletileg megalapozottnak. Ennek szisztematikus vizsgálata még további feladatot jelent. Mivel a szükséges térerősségek nem nagyok, kísérletileg könnyen megvalósítható és ha sikerül homogén mintákat előállítani, akkor a kiértékelés is egyszerűnek látszik.
- a.2. Javasolom a forró-elektronok szóródását vizsgálni diszlokációkon. Ez lehetőséget ad — többek között — a diszlokációk körüli makroszkópikus potenciál leírására használt kifejezés ellenőrzésére. Itt is homogén diszlokáció-eloszlású minták szükségesek.
- a.3. Az elvégzett elméleti vizsgálatok alapján javasolom a rekombinációs hullámok gerjesztését (ponthibák mellett) éldiszlokációkkal megvalósítani. Ehhez teljesen megfelelő pl. sekély akceptorokkal kompenzált (n-típusú) germániumot, vagy szilíciumot használni.

Értekezésem befejezéseként szeretném kifejezni azt a meggyőződésemet, hogy az egyensúlytól távoli rendszerek fizikája, s ezen belül az áraminstabilitások problémája, még számos új elméleti és gyakorlati vonatkozásban is igen fontos jelenséget tartogat, amelyek felkutatására nemcsak érdemes, de szükséges is időt és energiát fordítani.

## IRODALOM

### I. fejezet

- I. 1. *B. K. Ridley*, Proc. Phys. Soc. (London) 82, 954, 1963.
- I. 2. *P. Glansdorff and I. Prigogine*: Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations, Wiley-Interscience, London, 1971.
- I. 3. *V. L. Bonch-Bruевич, I. P. Zvyagin, A. G. Mironov*: Domennaja elektricseskaja nyeusztojszivoszty v poluprovodnyikah. Izd. Nauka, Moszkva, 1972.
- I. 4. *B. K. Ridley and R. G. Pratt*, Phys. Letters 4, 300, 1963. és Proc. Int. Conf. on the Physics of Semiconductors Paris, Dunod, 1964, pp. 487—493.
- I. 5. *I. A. Kurova i S. G. Kalashnikov*, FTT, 5, 3233, 1963.
- I. 6. *A. Barraud*, C. R. Acad. Sci. Paris 256, 3632, 1963.



- I. 7. K. W. Böer, H. J. Hansh and U. Kümmel, *Z. Phys.* 155, 170, (1959); *phys. stat. sol.* 4, 237, 1964.
- I. 8. M. S. Kagan and S. G. Kalashnikov, *Proc. of the International Conference on the Physics of Semiconductors, Kyoto 1966.* pp. 537—540.
- I. 9. P. Sviszt and J. Schanda, *Acta Phys. Hung.* 14, 121, 1962.
- I. 10. P. H. Wisbey and B. K. Ridley *J. Phys. C. Solid-State Physics* 3, 211, 1970.
- I. 11. K. Germanova, K. Marinova and M. Stefanova, *phys. stat. sol. (a)* 1, 421, 1970.
- I. 12. H. K. Sacks and A. G. Milnes, *Int. J. Electronics*, 30, 49, 1971.
- I. 13. B. K. Ridley and T. B. Watkins, *Proc. Phys. Soc. London*, 78, 293, 1961.
- I. 14. J. B. Gunn, *IBM J. Res. Develop.* 8, 141, 1964; *Solid-State Commun.* 1, 88, 1963.
- I. 15. H. Kroemer, *Proc. IEEE* 52, 1736, 1964.
- I. 16. A. G. Foyt and A. L. McWhorter, *Trans. IEEE ED-13*, 79, 1966.
- I. 17. J. C. McGroddy and M. I. Nathan, *IBM J. Res. Develop.* 11, 337, 1967.
- I. 18. A. A. Kastalski i S. M. Ryvkin: *Proc. of the Int. Conference on the Physics of Semiconductors, Moscow, 1968* pp. 955-59.
- I. 19. G. W. Ludwig and M. Aven, *J. Appl. Phys.* 38, 5326, 1967.
- I. 20. C. Hilsum, J. B. Mullin, B. A. Prew, H. D. Rees and B. W. Straughan, *Electronics Letters*, 6, 307, 1970.
- I. 21. G. Weinreich, T. M. Sanders and H. G. White, *Phys. Rev.* 114, 33, 1959.
- I. 22. H. D. Nine, *Phys. Rev. Letters* 4, 359, 1960.
- I. 23. A. R. Hutson, J. M. McFee and D. L. White, *Phys. Rev. Letters* 7, 237, 1961.
- I. 24. R. W. Smith, *Phys. Rev. Letters* 9, 87, 1962.
- I. 25. P. O. Sliva and R. Bray, *Phys. Rev. Letters*, 14, 372, 1965.
- I. 26. W. Haydl and C. F. Quate, *Phys. Letters* 20, 463, 1966.
- I. 27. G. Quentin and J. M. Thuillier, *Phys. Letters* 19, 631, 1966.
- I. 28. N. I. Meyer and M. H. Jorgensen, *Phys. Letters* 20, 450, 1966.
- I. 29. C. Hervouet, J. Lebailly, P. Leroux-Hugon and R. Veilex, *Solid-State Communications* 3, 413, 1965.
- I. 30. T. Aoki, K. Hayakawa and T. Arizumi, *Supplement to the Journal of the Jap. Soc. Appl. Physics* 39, 7, 1970.
- I. 31. Rösner Béla, *Kandidátusi Értekezés.* 1972.
- I. 32. Yu. V. Gulyaev, P. E. Zylberman, E. M. Epstein: *Proc. of the Int. Conf. on the Physics of Semiconductors, Moscow, 1968* pp. 914—918.
- I. 33. W. Franz: *Dielektrische Durchschlag: Handbuch der Physik XVII.* Springer-Verlag 1956.
- I. 34. J.J. O'Dwyer, *The theory of dielectric breakdown of solids*, Oxford, Clarendon Press, 1964.
- I. 35. B. Ancker—Johnson, *Plasma effects in Solids: Semiconductors and Semimetals*, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer Vol. 1. AP. New York and London, 1966.
- I. 36. Demeter S. és Pataki Gy., *Műszaki Tudomány* 45, 435, 1972.
- I. 37. Henk K. és Pataki Gy., *Műszaki Tudomány* 45, 423, 1972.
- I. 38. J. Bok, *Ann. de Radioelectr.* 15, 120, 1960.
- I. 39. A. L. McWhorter and R. M. Rediker, *Proc. IRE* 47, 1207, 1959.
- I. 40. K. Somogyi, *Jap. J. Appl. Phys.* 9, 232, 1970 és *Acta Phys. Hung.* 29, 383, 1970.
- I. 41. G. Pataki and K. Henk, *phys. stat. sol.* 34, K1, 1969.
- I. 42. C. N. Berglund; *Trans. IEEE ED-16* 433, 1969
- I. 43. K. L. Ashley and A. G. Milnes, *J. Appl. Phys.* 35, 369, 1964.
- I. 44. A. M. Barnett: „Injection Phenomena” c. cikke a *Semiconductors and Semimetals*, AP, New York, 1970 Vol. 6-ban.
- I. 45. Pataki György, *Plazmák szilárd testekben, függelék W. B. Thompson „Bevezetés a plazmafizikába” című könyvhöz, MK 1970 (305—329 oldal).*
- I. 46. N. Holonyak and S. F. Bevacqua, *Appl. Phys. Lett.* 2, 71, 1963.
- I. 47. O. V. Konstantinov i V. I. Perel, *FTT*, 6, 3364, 1964.
- I. 48. I. V. Karpova, S. G. Kalashnikov, O. V. Konstantinov, V. I. Perel, G. V. Tzarenkov, *phys. stat. sol.* 33, 863, 1969.
- I. 49. Yu. I. Zavadski i B. V. Kornilov, *FTT*, 11, 1494, 1969.
- I. 50. B. G. Streetman, N. Holonyak, H. V. Krone and W. D. Compton: *Appl. Phys. Lett.* 14, 63, 1969.
- I. 51. W. Viehman, *Appl. Phys. Lett.* 14, 39, 1969.
- I. 52. K. Marinova; *Appl. Phys.* 1, 141, 1973.



- I. 53. *I. L. Ivanov i S. M. Ryvkin*, ZsTF 28, 774, 1958.
- I. 54. *R. D. Larrabee and M. C. Steele*, J. Appl. Phys. 31, 1519, 1960 és J. Appl. Phys. 34, 880, 1963.
- I. 55. *M. Glicksman*, Phys. Rev. 124, 1655, 1961.
- I. 56. *L. E. Gurevich i I. V. Ioffe*, FTT 4, 2641, 1962 és FTT 4, 2964, 1962.
- I. 57. *B. B. Kadomtsev and A. V. Nedospasov*, J. Nucl. Energy 1, 230, 1960.
- I. 58. *G. Pataki*: Solid-State Electronics, 8, 611, 1965.
- I. 59. *K. Ando and M. Glicksman*, Phys. Rev. 154, 316, 1967.
- I. 60. *M. Schulz und E. Voges*, Z. für Ang. Phys. 25, 141, 1968.
- I. 61. *Pataki Gy.*: Kandidátusi értekezés 1966 és Magyar Fizikai Folyóirat 15, 551—610, 1967.
- I. 62. *G. Pataki*: Proc. of the International Conf. on the Physics of Semiconductors, Paris, Dunod, 1964 pp. 823—830.
- I. 63. *B. K. Ridley*: Trans. IEEE ED-13, 41, 1966.
- I. 64. *E. M. Conwell and M. O. Vassel*, Trans. IEEE ED-13, 22, 1966.
- I. 65. *Pataki Gy.*: „Áraminstabilitások félvezetőkben” ELTE Kari Jegyzet, megjelenés alatt.

## II. fejezet

- II. 1. *B. K. Riedley*, Proc. Phys. Soc. London 86, 637, 1965.
- II. 2. *V. L. Bonch—Bruevich i M. S. Kogan*: FTT 7, 23, 1965.
- II. 3. *B. K. Rindley*, Trans. IEEE ED-13, 41, 1966.
- II. 4. *R. W. Engelmann and C. F. Quate*, Trans. IEEE ED-13, 44, 1966.
- II. 5. *Y. Nishimura*, Electronics Letters 4, N° 12, 1968.
- II. 6. *P. N. Butcher*, Phys. Letters, 19, 546 1965.
- II. 7. *V. L. Bonch-Bruevich*, Phys. Letters (Netherlands) 20, 249, 1966.
- II. 8. *A. F. Volkov*, FTT 8, 3187, 1966.
- II. 9. *S. G. Kalashnikov and V. L. Bonch-Bruevich*, phys. stat. sol. 16, 197, 1966.
- II. 10. *K. W. Böer and G. A. Dussel*, Phys. Rev. 154, 292, 1967.
- II. 11. *V. L. Bonch-Bruevich*, FTT 8, 1753, 1966 és Proc. of the Int. Conf. on the Physics of Semic. Kyoto, 1966 p. 509.
- II. 12. *K. E. Kröll*: phys. stat. sol. 24, 707, 1967.
- II. 13. *B. L. Gelmot i M. S. Sur*, FTT 11, 2116, 1971.
- II. 14. *P. N. Butcher and W. Fawcett*, Brit. J. Appl. Phys. 17, 1425, 1966.
- II. 15. *P. N. Butcher, W. Fawcett and N. R. Ogg*, Brit. J. Appl. Phys. 18, 755, 1967.
- II. 16. *J. V. Allen, W. Shockley and G. L. Pearson*, J. Appl. Phys. 37, 3191, 1966.
- II. 17. *B. W. Knight and G. A. Peterson*, Phys. Rev. 147, 617, 1966, valamint Phys. Rev. 155, 393, 1967.
- II. 18. *J. B. Gunn*, IBM J. Res. Develop. 13, 591, 1969.
- II. 19. *E. J. Aas*, IBM J. Res. Develop. 14, 689, 1970.
- II. 20. *E. L. Junes, R. Strattun, C. A. Barlow and D. R. Powell*, J. Appl. Phys. 41, 3498, 1970.
- II. 21. *G. Pataki*, Phys. Letters 26A, 24, 1967.
- II. 22. *G. Pataki*, Acta Phys. Hung. 24, 119, 1968.
- II. 23. *G. Pataki*, Acta Phys. Hung. 25, 377, 1968.
- II. 24. *G. Pataki*, Proc. of the Int. Conf. on the Physics of Semiconductors, Moscow, 1968. p. 1001.
- II. 25. *G. Pataki*, Acta Phys. Hung. 27, 421, 1969.
- II. 26. *G. Pataki*: Proc. of the Symposium on Plasma Physics and Electrical Instabilities in Solids. Mintis Pub. House, Vilnius, 1972. 245—249. (A konferencia 1971. jún. 10—12 között volt, Vilniusban)
- II. 27. *N. Minorsky*: Non-linear Oscillations, Van Nostrand, Princeton, N. J. 1962.
- II. 28. *N. N. Bogoljubov i Jo. A. Mitropolszki*: Aszimptoticszkie metodi v teorii nyelinyejnyih kolebanij. Fizmatgiz, Moszkva, 1958.
- II. 29. *N. N. Mojszejev*: Aszimptoticszkie metodi nyelinyejnoj mehaniki. Izd. Nauka, Moszkva. 1969.
- II. 30. *V. L. Bonch-Bruevich, I. P. Zwyagin i A. G. Mironov*: Domennaja elektricseszkaja nyeusztojesivoszty v poluprovodnyikah, Izd. Nauka, Moszkva. 1972.
- II. 31. *D. E. McCumber and A. G. Chynoweth*, Trans. IEEE ED-13, 4 1966.
- II. 32. *I. B. Bott and W. Fawcett*: The Gunn Effect in Gallium Arsenide: Advances in Microwaves, Vol. 3. AP, 1968.



- II. 33. *V. L. Bonch-Bruevich*, phys. stat. sol. 22, 267, 1967.
- II. 34. *K. E. Kröll*: Dissertation zur Erlangung der Doktorwürde, Marburg, 1967.
- II. 35. *H. Kroemer*, Trans. IEEE ED-13, 27, 1966.
- II. 36. *B. K. Ridley*, Brit. J. Appl. Phys. 17, 595, 1966.

### III. fejezet

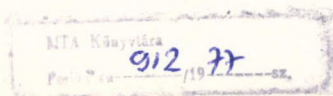
- III. 1. *H. K. Sacks and A. G. Milnes*, Int. J. of Electronics 28, 565, 1970.
- III. 2. *H. K. Sacks and A. G. Milnes*, Int. J. of Electronics 30, 49, 1971.
- III. 3. *R. G. Pratt and B. K. Ridley*, Proc. Phys. Soc. 81, 996, 1963.
- III. 4. *V. L. Bonch-Bruevich*, FTT, (Szbornyik Sztatyej) 2, 182, 1959.
- III. 5. *V. G. Alekseyeva, N. G. Zadanova, M. S. Kagan, S. G. Kalashnikov, E. G. Landsberg*: „Proc. of the Symposium on Plasma Physics and Electrical Instabilities in Solids”, Mintis Pub. House, Vilnius, 1972, 95—101 oldal.
- III. 6. *V. Székely and K. Tarnay*, Electronics Letters 4, 593, 1968.
- III. 7. *J. B. Gunn*: Proc. of the Int. Conf. Phys. Semicond., Kyoto, 1966. pp. 505—508.
- III. 8. *I. A. Kurova, M. Vrana*: Proc. of the Int. Conference on the Physics of Semiconductors, Moscow, 1968, valamint FTP 2, 1838, 1968.
- III. 9. *B. K. Ridley and R. G. Pratt*: Proc. of the Int. Conference on the Physics of Semiconductors, Paris, 1964 (p. 487).
- III. 10. *R. Smith*: Semiconductors, UP. 1959.
- III. 11. *K. W. Böer*, Phys. Rev. 139A, 1949, 1965.
- III. 12. *D. C. Northrop, P. R. Thorton and K. E. Trezise*, Solid-State Electronics 7, 17, 1964.
- III. 13. *A. P. Kulsreshtha i A. E. Younvich*, FTT 8, 353, 1966.
- III. 14. *V. S. Bagaev, Yo. N. Berozashvili i B. M. Vull*, FTP 2, 200, 1968, valamint Yu. N. Berozashvili Értekezés Tézisei, Lebegyev Fiz. Int. 1968 (oroszul).
- III. 15. *Y. Tokumaru and M. Kikuchi*, Japan J. Appl. Phys. 6, 654, 1967, valamint 7, 95, 1968.
- III. 16. *Y. Tokumaru*, Japan J. Appl. Phys. 8, 76, 1969, valamint 9, 95, 1970.
- III. 17. *Yu. V. Vorobev, Y. I. Korkhanin and O. V. Tretyak* phys. stat. sol. 36, 499, 1969.
- III. 18. *M. Schulz and B. K. Ridley*, Solid State Commun. 7, 129, 1969.
- III. 19. *E. J. Cresceuzi*: Ph. D. Thesis, University of Colorado Boulder, USA, 1969.
- III. 20. *B. K. Ridley, I. J. Crisp and F. Shishyanu*, J. Phys. C. Solid State Physics 5, 187, 1972.
- III. 21. *B. K. Ridley i F. S. Shishyanu*, FTP 5, 905, 1973.
- III. 22. *B. K. Ridley*, J. Phys. C. Solid State Physics 7, 1169, 1974.
- III. 23. *G. Pataki i S. Püspöki*, FTP 4, 1177, 1970, valamint Acta Phys. Hung. 30, 99, 1971.
- III. 24. *S. Püspöki*: Egyetemi doktori értekezés, MTA MÜFI, 1972.
- III. 25. *F. S. Shishyanu*: Személyes közlés, 1974.
- III. 26. *R. W. Haisty and G. R. Cronin*: Proc. of the International Conference on the Physics of Semiconductors, Paris, 1964 pp. 1161—1167.
- III. 27. *R. Williams*, J. Appl. Phys. 37, 3411, 1966.

### IV. fejezet

- IV. 1. *B. W. Knight and G. A. Peterson*, Phys. Rev. 155, 393, 1967.
- IV. 2. *V. L. Bonch-Bruevich*, FTP 1, 239, 1967.
- IV. 3. *G. Pataki*, FTP 2, 206, 1968.
- IV. 4. *M. Ohtomo*, Jap. J. of Appl. Phys. 7, 1368, 1968.
- IV. 5. *I. P. Zwyagin*, FTP 3, 33, 1969.
- IV. 6. *M. A. Neumark*: Linear Differential- operatoren Akademie-Verlag, Berlin, 1963.

### V. fejezet

- V. 1. *S. R. Morrison*, Phys. Rev. 104, 619, 1956.
- V. 2. *G. K. Wertheim and G. L. Pearson*, Phys. Rev. 107, 694, 1957.
- V. 3. *J. B. Arthur, A. F. Gibson, J. W. Granville and E. G. S. Paige*, Phil. Mag. 3, 950, 1958.
- V. 4. *J. J. Brophy*, J. Appl. Phys. 27, 1383, 1956.
- V. 5. *A. D. Kurtz, S. A. Kuln and B. L. Averbach*, Phys. Rev. 101, 1258, 1956.
- V. 6. *J. Okada*, J. Phys. Soc. Japan 12, 1338, 1957.
- V. 7. *H. Lemke*, phys. stat. sol. 12, 125, 1965.
- V. 8. *T. Figielski*, phys. stat. sol. 6, 429, 1964.
- V. 9. *T. Figielski*, phys. stat. sol. 9, 555, 1965.





- V. 10. *V. L. Bonch-Bruevich*, FTT (suppl.) II. 182, 1959.
- V. 11. *Yu. V. Gulyaev*, FTT 4, 1285, 1962.
- V. 12. *W. Schröter*, phys. stat. sol. (a) 19, 159, 1973.
- V. 13. *J. Lagowski*, phys. stat. sol. 26, K69, 1968.
- V. 14. *V. L. Bonch-Bruevich i V. B. Glasko*, FTT 3, 36, 1961.
- V. 15. *Z. Golacki, T. Figielski and M. Jastrzebska*, phys. stat. sol. 26, K69, 1968.
- V. 16. *R. H. Glaenger and A. G. Jordan*, Solid-State Electronics 12, 247—258, 1969.
- V. 17. *W. T. Read*, Phil. Mag. 45, 775, 1954.
- V. 18. *G. Pataki*, phys. stat. sol. (a) 8, 411, 1971.
- V. 19. *L. I. Kolesnik*, FTT 4, 1449, 1962.
- V. 20. *E. M. Conwell*: High Field Transport in Semiconductors, AP, New York—London, 1967.
- V. 21. *V. L. Bonch-Bruevich*, FTT 6, 2047, 1964.
- V. 22. *I. S. Gradshtein i I. M. Ryzik*: Tablici integralov --- Gosz. Izd. FML; Moszkva, 1963.
- V. 23. *B. Pöddör*, Acta Phys. Hung. 23, 393, 1967.
- V. 24. *J. Yamashita and M. Watanabe*, Progr. of Theoretical Physics 12, 443, 1954.
- V. 25. *V. L. Bonch-Bruevich i S. G. Kalashnikov*, FTT 7, 750, 1965.
- V. 26. *R. Stratton*, Proc. Phys. Soc. A242, 355, 1957.
- V. 27. *H. G. Reik and H. Risken*, Phys. Rev. 124, 777, 1961.
- V. 28. *Yu. A. Osipyan i S. A. Schevchenko*, ZsETF 61, 2330, 1971.
- V. 29. *E. C. Ross and G. Warfield*, J. Appl. Phys. 41, 2657, 1970.
- V. 30. *W. Szkielko, T. Figielski and E. Kamieniecki*: „Proc. of the symposium on plasma physics and electrical instabilities in solids” Mintis Publ. Hause, Vilnius, 1972, pp. 159—161.

#### VI. fejezet

- IV. 1. *O. V. Konstantinov, V. I. Perel*, FTT 6, 3364, 1964.
- VI. 2. *O. V. Konstantinov, V. I. Perel i G. V. Tzarenkov*, FTT 9, 1761, 1967.
- VI. 3. *I. V. Karpova, S. G. Kalashnikov, O. V. Konstantinov, V. I. Perel and G. V. Tzarenkov*: Proc. of the IX. Int. Conf. on the Physics of Semiconductors, Moscow, 1968. pp. 959—965.
- VI. 4. *P. Antognetti, A. Chiabrera and S. Ridella*, Appl. Phys. Lett. 18, 554, 1971.
- VI. 5. *P. Antognetti, A. Chiabrera and S. Ridella*: Solid-State Electronics 14, 1123, 1971.
- IV. 6. *P. Antognetti, A. Chiabrera and S. Ridella*, J. Appl. Phys. 43, 4676, 1972.
- IV. 7. *W. H. Weber and G. W. Ford*, Appl. Phys. Letters 18, 241, 1971.
- VI. 8. *W. H. Weber and G. W. Ford*, Solid-State Electronics 15, 1277, 1972.
- VI. 9. *O. V. Konstantinov i G. V. Tzarenkov*, FTT 8, 1866, 1966.
- VI. 10. *G. Pataki*: International Meeting on the Photoelectrical and Optical Phenomena in Solids, Varna, 1974.

#### VII. fejezet

- VII. 1. *J. Pastrnak*, phys. stat. sol. 22, 407, 1967.
- VII. 2. *M. Sato*, J. Phys. Soc. Japan 27, 1501, 1969.
- VII. 3. *K. Takeyama*: International Symposium on High Field Transport in Semiconductors, Modena 1973. Előadáskivonat.
- VII. 4. Non-equilibrium thermodynamics, variational techniques and stability, edited by R. I. Donnelly, R. Herman and I. Prigogine. The University of Chicago Press, 1965 könyvben P. H. Roberts, valamint D. M. Gage, M. Schiffer, S. J. Kline and W. C. Reynolds dolgozatai.
- VII. 5. *I. Fényes*: Termosztatika és termodinamika MK, Budapest, 1968, könyvben 273. oldal.
- VII. 6. *A. F. Volkov, S. M. Kogan*, Uszp. Fiz. Nauk. 96, 633, 1968.
- VII. 7. *G. Pataki, G. Elsner and T. Németh*, Japan. J. Appl. Phys. 6, 278, 1967.
- VII. 8. *G. Pataki and K. Henk*, phys. stat. sol. 34, K1, 1969.

### Köszönetnyilvánítás

Azt, hogy értekezésem témaköréhez tartozó munkámat lezárhattam és az értekezést magát viszonylag rövid 10 hónap alatt összeállíthattam, elsősorban annak a nyugodt alkotó légkörnek köszönhetem, amelyet a Központi Fizikai Kutató Intézet Szilárdtestelméleti Osztályán találtam. Ezért elsősorban *Pál Lénárd* akadémikusnak mondok köszönetet, aki ezt a lehetőséget számomra biztosította és aki értekezésem megírására állandóan ösztönzött.



Köszönet illeti volt munkatársaimat, akik a Műszaki Fizikai Kutató Intézetben számos kérdés tisztázásában, illetve megoldásában résztvettek: Beleznay Ferencet, a fizikai tudományok kandidátusát, *Henk Károly* és *Püspöki Sándor* tudományos munkatársakat. Köszönet illeti mindazon kollégákat, akik a MÜFI tudományos „Gombás-szeminárium” keretében munkáim vitájában résztvettek és észrevételeikkel, kritikai megjegyzéseikkel segítettek.

Értekezésem jelentős része féléves moszkvai tanulmányutam során alakult ki. Elsősorban *V. L. Bonch-Bruevich* professzornak mondok köszönetet, akivel a domén-instabilitás számos kérdését megvitathattam és aki a DAP-módszer kidolgozásának korai szakaszában felhívta figyelmemet egy matematikai pontatlanságra. Ugyancsak nagy segítséget jelentett munkatársával, *Dr. I. G. Zwyaginnal* folytatott diszkusszió is.

Igen nagy segítséget jelentett számomra az a lehetőség, hogy *I. A. Kurovával*, a fizikai tudományok kandidátusával, és aspiránsával *M. Vranával* több alkalommal diszkutáltuk a mért domén-sebesség elméleti interpretálásának problémáját, elsősorban az arannyal kompenzált germánium esetében.

Hasznos diszkussziót folytattam *O. V. Konsztantinov* professzorral a rekombinációs hullámok elméletéről, és *Dr. T. Figielskivel* a forró-elektronok diszlokációkon való rekombinációjának elméleti és kísérleti kérdéseivel kapcsolatban.

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András

A káziat beérkezett: 1976. július 26. — Terjedelem: 8,75 (A/5) ív

76-3202 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József íg.

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA



A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.

Ára: 10,—Ft  
Előfizetés kötetenként: 48,— Ft

INDEX: 26491

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Pataki György: Vizsgálatok az áraminstabilitások köréből félvezetőkben .....</i>	495
---	-----



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXIV. KÖTETÉHEZ

## TÁRGYMUTATÓ

<i>Apagyi Barnabás</i> : Az $\alpha$ -bomlás elmélete és alkalmazásai	1
<i>Rajkovits Zsuzsa és Kovács István</i> : Szemecsehatármozgás polikristályos fémekben	45
<i>Nagy Károly</i> : Variációs elvek a fizikában	69
<i>Varga László</i> : $g$ -faktorok mérése perturbált szögeloszlás módszerrel	83
<i>Uray László</i> : A volfrám nyomszennyezőinek és rácshibáinak vizsgálata elektromos transzport-tulajdonságok segítségével	127
<i>Perjés Zoltán</i> : Stacionárius gravitációs terek tulajdonságai	173
<i>Illy József</i> : Einstein és a mozgótestek elektrodinamikája	249
<i>Groma Géza—Kovácsné Csetényi Erzsébet</i> : Reverziós és újraneemesedési folyamatok vizsgálata Al—Zn—Mg ötvözetben	271
<i>Jéki László</i> : A $^{252}\text{Cf}$ spontán hasadásánál keletkező neutronok energiaeloszlása	281
<i>Solt György</i> : Újabb eredmények fémek kohéziójának és rácsdinamikájának elméletében	343
<i>Fái György</i> : Az $^{16}\text{O}$ atommag paritáskereső alfa-bomlása	393
<i>Brájer László, Kovács István és Tasnádi Péter</i> : Kúszás és feszültségrelaxáció fémekben	441
<i>Pataki György</i> : Vizsgálatok az áramstabilitások köréből félvezetőkben	495

## KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>R. Mitra</i> : Numerical and Asymptotic, Techniques in Electromagnetics ( <i>Bárdi István</i> )	77
<i>H. II. Regions and Related Topics, Lecture Notes in Physics 42 (Marik Miklós)</i>	78
<i>Kapuy Ede és Török Ferenc</i> : Atomok és molekulák kvantumelmélete ( <i>T. Gy.</i> )	79
<i>M. Cardona</i> : Light Scattering in Solids ( <i>T. Gy.</i> )	79
<i>B. R. Borett</i> : Effektív kölcsönhatások és operátorok a magfizikában ( <i>L. T.</i> )	80
<i>S. Haroche, J. C. Peabay—Peyroula, T. W. Hänsel and S. E. Harris</i> : Laser Spectroscopy ( <i>T. Gy.</i> )	80
<i>T. S. Huang</i> : Processing and Digital Filtering ( <i>T. Gy.</i> )	81
<i>Lj. Novaković</i> : The Pseudo-spin Method in Magnetism and Ferroelectricity ( <i>S. T.</i> )	81
<i>H. Walter</i> : Laser Spectroscopy of Atoms and Molecules ( <i>Bakos József</i> )	271
<i>Sz. V. Tyablikov</i> : Metodü kvantovoj teorü magnetizma (A mágnesség kvantumelméletének módszerei) ( <i>S. T.</i> )	395
<i>J. Erő, J. Szűcs</i> : Nuclear structure study with neutrons ( <i>L. A.</i> )	395
<i>Menyhárd Nóra</i> : IUPAP International Conference on Statistical Physics ( <i>Kondor Imre</i> )	396
<i>F. Esterman</i> : Laser ( <i>T. Gy.</i> )	397
<i>K. Wiesemann</i> : Einführung in die Gaselektronik ( <i>T. Gy.</i> )	397
<i>S. Grossmann</i> : Mathematischer Einführungskurs für die Physik ( <i>T. Gy.</i> )	397
<i>C. S. Willett</i> : Introduction to Gas Lasers: Population Inversion Mechanics ( <i>T. Gy.</i> )	398
<i>Landolt—Börnstein</i> : Neue Serie ( <i>Raksányi Kund</i> )	398
<i>J. C. Dainty</i> : Laser Speckles and Related Phenomena ( <i>Bakos József</i> )	399
<i>K. H. Hellwege</i> : Einführung in die Festkörperphysik ( <i>T. Gy.</i> )	400
<i>J. T. Oden és J. N. Reddy</i> : Variational Methods in Theoretical Mechanics ( <i>Nagy Károly</i> )	400
Foundations of Quantum Mechanics and Ordered Linear Spaces ( <i>Nagy Károly</i> )	400
<i>H. G. Schuster</i> : One-dimensional conductors ( <i>M. D.</i> )	401
<i>H. J. Wirz</i> : Progress in Numerical Fluid Dynamics ( <i>Szabó János</i> )	401
<i>Reinhard A. Breuer</i> : Gravitational Perturbation Theory and Synchrotron Radiation ( <i>Abonyi Iván</i> )	401
<i>B. Humpert</i> : Dynamical Concepts on Scaling Violation and the New Resonances in $e^+ e^-$ Annihilation ( <i>N. K.</i> )	402
<i>E. J. Flaherty</i> : Hermitian and Kählerian Geometry in Relativity ( <i>Abonyi Iván</i> )	402



<i>William G. Harter—Christopher W. Patterson: A Unitary Calculus of Electronic Orbitals (J. J.)</i>	402
<i>R. Gomer: Interactions on Metal Surfaces (T. Gy.)</i>	403
<i>T. Tamir: Intergrated Optics (T. Gy.)</i>	403
<i>U. Gonser: Mössbauer Spectroscopy (T. Gy.)</i>	403
<i>R. N. West: Positron Studies of Condensed Matter (B. Á.)</i>	465
<i>J. Moser (ed.): Dynamical Systems, Theory and Applications (Szabó János)</i>	465
<i>H. Araki (ed.): Mathematical Problems in Theoretical Physics (Sz. D.)</i>	466
<i>Robert D. Richtmayer (ed.): Proceedings of the Fourth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics (Szabó János)</i>	466



# A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXIV. KÖTETÉHEZ

## NÉVMUTATÓ

<i>Apagy Barnabás: Az <math>\alpha</math>-bomlás elmélete és alkalmazásai</i>	1
<i>Brájer László, Kovács István és Tasnádi Péter: Kúszás és feszültségrelaxáció fémekben</i>	441
<i>Fái György: Az <math>^{16}\text{O}</math> atommag paritássértő alfa-bomlása</i>	393
<i>Groma Géza—Kovácsné Csetényi Erzsébet: Reverziós és újranevesedési folyamatok vizsgálata</i>	
Al—Zn—Mg ötvözetben	271
<i>Illy József: Einstein és a mozgó testek elektrodinamikája</i>	249
<i>Jéki László: A <math>^{252}\text{Cf}</math> spontán hasadásánál keletkező neutronok energiaeloszlása</i>	281
<i>Kovács István l. Rajkovits Zsuzsa</i>	
<i>Kovács István l. Brájer</i>	
<i>Kovácsné Csetényi Erzsébet l. Groma</i>	
<i>Nagy Károly: Variációs elvek a fizikában</i>	69
<i>Pataki György: Vizsgálatok az áramstabilitások köréből félvezetőkben</i>	495
<i>Perjés Zoltán: Stacionárius gravitációs terek tulajdonságai</i>	173
<i>Solt György: Újabb eredmények fémek kohéziójának és rácsdinamikájának elméletében</i>	343
<i>Tasnádi Péter l. Brájer</i>	
<i>Uray László: A volfrám nyomszennyezőinek és rácshibáinak vizsgálata elektromos transzport-tulajdonságok segítségével</i>	127
<i>Varga László: g-faktorok mérése perturbált szögeloszlás módszerrel</i>	83



